PRINCIPIO DE MAXIMA ENTROPIA EN SISTEMAS CUANTICOS DE MUCHOS CUERPOS

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

Departamento de Física, Universidad Nacional de La Plata, C.C. 67, 1900 La Plata

Se presenta un método sistemático para la inferenia del estado fundamental de un sistema de muchos cuerpos en base a información incompleta. El esquema, basado en el principio de máxima entropía, es también apto para la construcción de aproximaciones variacionales. Los resultados indican que excelentes predicciones, superiores a aquellas brindadas por tratamientos proyectados de campo medio, pueden ser obtenidas a partir de un conjunto reducido de valores medios o parámetros variacionales, inclusive en regiones críticas.

INTRODUCCION

El propósito de este trabajo es aplicar conceptos derivados de la teoría de la información[1,9] al estudio de estados puros en sistemas cuánticos de muchos cuerpos. El objetivo es el de desarrollar un formalismo capaz de reconstruir estos estados en base a un conjunto incompleto de valores medios arbitrarios. El esquema resultante brinda una descripción muy precisa con sólo unos pocos valores medios (o parámetros) relevantes, aún en regiones críticas[4], en las cuales los métodos tradicionales (por ejemplo las distintas aproximaciones de campo medio para un número finito de partículas) no proporcionan una descripción correcta[5].

FORMALISMO

Consideremos un sistema cuántico descripto por un estado $|\psi>$, y sea $\{|j>, j = 1,\ldots,L\}$ un conjunto ortonormal completo de estados, tal que

$$|\psi> = \sum_j C_j |j> \qquad (1)$$

Este conjunto completo puede ser considerado como una base no perturbada (es decir el conjunto de autoestados de un hamiltoniano no perturbado H_o) que suponemos conocida por el observador. Además, del operador densidad usual $\rho = |\psi><\psi|$, definiremos una densidad diagonal ρ_d tal que

$$<j|\rho_d|k> = \delta_{jk}|C_j|^2 \qquad (2)$$

De esta forma, (2) contiene información sólo sobre la distribución de probabilidades en la base perturbada, correspondiente al estado $|\psi>$. Asociada con ρ_d, introducimos la "entropía cuántica"[6,7]

$$S_c = -\mathrm{Tr}\rho_d \ln(\rho_d) = -2\sum_j |C_j|^2 \ln(|C_j|) \qquad (3)$$

que mide la falta de información relacionada con la distribución sobre los estados no perturbados, distinta de la entropía usual $S = -\mathrm{Tr}\, \rho \ln(\rho)$ (la cual se anula para estados puros). La entropía (3) mide sólo la inofrmación relacionada con los elementos diagonales de ρ, siendo de esta forma no nula.

Asumiremos ahora que la información de la que disponemos sobre el sistema, suponiendo que se halla en un estado puro $|\psi>$ se refiere a un conjunto de valores de expectación b_i de n observables linealmente independientes O_i,

$$b_i \equiv <O_i> = \sum_{jk} C_k^* <k|O_i|j> C_j, \quad i = 1,\ldots,n \qquad (4)$$

Supondremos que el conjunto de valores medios (4) es incompleto, de tal forma que ellos no son suficientes para determinar $|\psi>$ univocamente. En estas circunstncias elegiremos (como idea central del trabajo) aquel estado que haga máxima la entropía (3). Introduciendo n multiplicadores de Lagrange λ_i, y variando la magnitud $S' = S_c - \Sigma_i \lambda_i <O_i>$, se obtiene

$$C_j^*\left[2\ln(|C_j|) + 1\right] + \sum_i \lambda_i \left(\sum_k C_k^* <k|\hat{O}_i|j>\right) = 0 \qquad (5)$$

En lo que sigue nos restringiremos al caso en el cual los observables O_i son diagonales en la base no perturbada. Resulta entonces

$$\rho_d = \exp\left(-1 - \sum_1 \lambda_i O_i\right) \qquad (6)$$

Puede probarse que la solución (6) existe y es única si los valores medios son linealmente independientes y físicamente aceptables. La expresión (6)

* Investigador del CONICET

** Investigador de la CIC.

proporciona un máximo de S_c para valores fijos de los valores medios b_i, y un máximo de S' para parámetros λ_i fijos.

La normalización de $|\psi|$ puede ser considerada como una restricción adicional en (4), si se incluye el operador identidad I, $<I>=1$, dentro del conjunto de operadores relevantes. La constante -1 en (6) puede ser incluida en el correspondiente multiplicador y será omitida de aquí en más.
En principio, los parámetros λ deben ser determinados a partir de (4) (inferencia estadística). En la formulación variacional, se determinan a partir de la minimización de <H>, suponiendo un hamiltoniano conocido.

ILUSTRACION

Aplicaremos estas ideas en un modelo fermiónico U(n)[6,8] con ejemplos numéricos para n=3. El modelo consiste de N = 20 fermiones distribuidos entre n niveles (2Ω degenerados) de partícula independiente (p.i.). Los estados de p.i. serán identificados por $|p, i>$, $p = 1, \ldots 2\Omega$, $\iota = 1, \ldots, n$. Supondremos que la información disponible sobre el sistema consiste de valores de expectación de funciones de los operadores colectivos

$$G_{ij} = \sum_p C^+_{pi} C_{pj} \qquad (7)$$

los cuales satisfacen un álgebra U(n) bajo conmutación. Consideraremos en particular la información obtenida del estado fundamental $|\psi>$ del hamiltoniano monopolar[6,9]

$$H = \sum_i \varepsilon_i G_{ii} + \sum_{i<j} V_{ij}\left(G^2_{ij} + G^2_{ji}\right) \qquad (8)$$

Nuestro propósito es reconstruir el estado $|\psi>$ en base al conocimiento de un conjunto incompleto de valores medios diagonales. En particular, analizaremos la descripción basada en operadores de uno y dos cuerpos. Supondremos también que la paridad del estado es conocida. De esta forma, nuestra densidad diagonal aproximada resulta

$$\rho_d = P\exp\left(\lambda_1 + \sum_{i\geq 2} \lambda_i G_{ii} + \sum_{i\geq j\geq 2} \lambda_{ij} G_{ii} G_{jj}\right) P \qquad (9)$$

donde P es el proyector sobre estados pares, y λ_1 la constante de normalización.

RESULTADOS

Con el objeto de poseer un marco de referencia para el exámen de la aproximación, los resultados se han comparado con aquellos proporcionados por Hartree-Fock (HF) proyectado (antes de la variación). Se han realizado dos tipos de estudios:

a) determinación de $|\psi>$ por inferencia estadìstica a partir de los valores medios $<G_{ii}>$ (aproximación de un cuerpo) y $<G_{ii}>$, $<G_{ii} G_{jj}>$ (aproximación de dos cuerpos);

b) determinación variacional. Los resultados obtenidos utilizando (9) no difieren apreciablemente en ambos casos. La aproximación de un cuerpo ($\lambda_{ij} = 0$, en (9)) es confiable sólo antes de la región crítica. En cambio, la aproximación de dos cuerpos es excelente en todo el rango de las costantes de acoplamiento, inclusive en regiones críticas, independientemente del tamaño del sistema (determinado por N). Los "overlaps" con la función de onda exacta son mayores que 0.99 en todos los casos, y las diferencias relativas de energía del orden de 10^{-9} o menores. Los resultados brindados por HF proyectado son, en todos los casos, de inferior calidad, dependiendo además fuertemente de la forma de determinación (mejoran en el caso de inferencia). Además, las soluciones variacionales exhiben

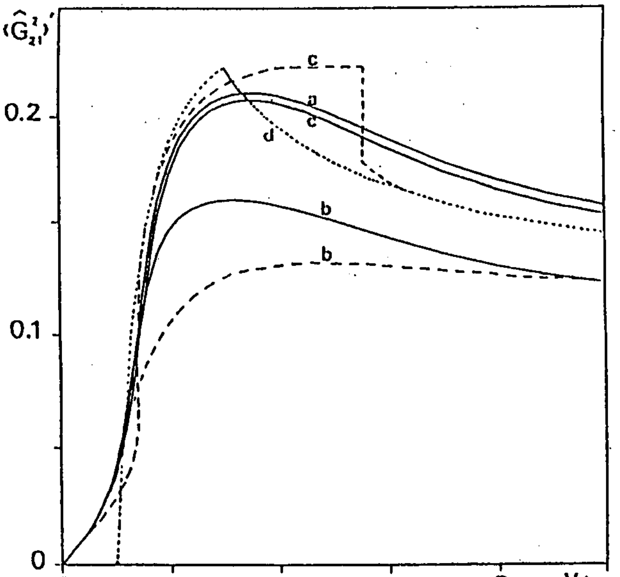

Figura 1:
Valor intensivo de $< G^2_{21} > \int < G^2_{21} > / [N (N - 1)]$ para el estado fundamental en función de v/ε (donde ε representa la separación entre niveles de p.i.) para N=20. (a) representa la aproximación de máxima entropía de dos cuerpos conjuntamente con el resultado exacto, indistinguibles en la escala de la figura; (b) corresponde a la aproximación de máxima entropía de un cuerpo y (c) a la aproximación de HF proyectado. Las líneas contínuas corresponden al método de inferencia, mientras que las líneas de trazos corresponden al cálculo variacional; (d) representa el resultado variacional proporcionado por HF no proyectado.

transiciones abruptas de primer orden. Estos resultados pueden apreciarse en la fig. 1, donde hemos elegido $V_{ij} = -v\ (1 - \delta_{ij})$, $\varepsilon_i = i\varepsilon$.

En resumen, hemos propuesto un método general para tratar el estado fundamental de sistemas de muchos cuerpos basado en conceptos derivados de la teoría de la información y la mecánica estadística. El esquema resultante (6) es equivalente a la expansión del logaritmo de la densidad diagonal asociada con un estado cuántico y es especialemnte adecuado para la reconstrucción del estado fundamental en base a información incompleta. Los resultados representan una mejora de uno o dos órdenes de magnitud con respecto a HF proyectado, proporcionando por consiguiente un esquema altamente competitivo con este tipo de aproximaciones debido a su simplicidad.

REFERENCIAS

1. A.Katz, "Principles of statistical mechanics" (Freeman, San Francisco, 1967).
2. A.Hobson, "Concepts in statistical machanics" (Gordon and Breach, London, 1971).
3. R.Balian, Y.Alhassid and H. Reinhardt, Phys. Rev. 131, (1986) 1&2
4. P.Ring and P.Shuck, "The nuclear many-body problem". (Springer, Berlin, 1980).
5. W.D.Heiss and A.A.Kotzé, Z.Phys. A331 (1988) 223; W.D.Heiss, Z.Phys. A 329 (1988) 133.
6. N.Canosa, A.Plastino and R.Rossignoli, Nucl.Phys. A 453 (1986) 417.
7. N.Canosa, A.Plastino and R.Rossignoli, Phys. Rev. A (en prensa).
8. J.Nuñez, A.Plastino R.Rossignoli and M.C.Cambiaggio, Nucl. Phys. A 444 (1985) 35.
9. N.Meshkov, Phys. Rev. C3 (1971) 2214.