ANSATZ PARA OBTENER LA FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN DE PROBABILIDADES DE FISHER DE POTENCIALES CONVEXOS

Flego, Silvana P.

Grupo de Investigación Teórica y Aplicada en Teoría de la Información (GTyATI).
Área Departamental de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería,
Universidad Nacional de La Plata (UNLP).
1 y 115 s/n, (1900) La Plata, Buenos Aires, Argentina.
flego@fisica.unlp.edu.ar

Resumen

La Medida de Información de Fisher (FIM) y la Ecuación de Schröedinger (SE) están íntimamente conectadas. De hecho, la FIM trabaja como una "acción" desde la cual puede construirse una lagrangeana cuya variación conduce a una SE. Luego, existe una estructura de Legendre conectando ambas teorías. La existencia de una tal estructura permite formular un ansatz, libre de parámetros, para la función de distribución de probabilidades de Fisher cuando intervienen *potenciales convexos pares*. En esta comunicación generalizamos el procedimiento para abordar situaciones en las que intervienen potenciales más generales.

Palabras claves: Teoría de la Información, Medida de Fisher, Estructura de Legendre, PDF-ansatz.

1. Introducción

Una fuerte motivación para usar la mecánica estadística es el hecho de usar un pequeño conjunto de valores de expectación relevantes para describir las principales propiedades de un sistema físico [1]. La conexión entre la Teoría de la Información (TI) y la Mecánica Estadística fue establecida por Jaynes [2,3] sobre la base de un abordaje variacional. Este implica extremar la medida de información de Shannon restringida a las condiciones impuestas por el conocimiento previo concerniente al sistema de interés. Jaynes ha mostrado que, si se elige la constante de Boltzmann como la unidad de información y se identifica la medida de Shannon con la entropía termodinámica, toda la mecánica estadística puede ser elegantemente reformulada sin hacer referencia a la noción de ensamble. La concomitante metodología es conocida como el Principio de Máxima Entropía [2,3]. Por otra parte, tal procedimiento no siempre conduce a una adecuada función de distribución [4]. Este hecho dio coraje para formular entropías alternativas. Surge así la medida de Fisher como candidata para reemplazar a la de Shannon [4-6]. Luego, la Medida de Información de Fisher (FIM), introducida en la literatura como un estimador estadístico, es ahora considerada como la contraparte *local* de la medida *global* de Shannon [5]. Una característica importante es el hecho que la optimización condicionada de la FIM conduce a una ecuación de Schrödinger (SE) [7-9]. Surgen así, intrigantes relaciones entre varias cantidades características del escenario cuántico con otras que caracterizan la termodinámica [8-11]. Una conexión sumamente interesante es el hecho que dos teoremas puramente cuánticos pueden ser re-interpretados como relaciones de reciprocidad de Legendre [12], permitiendo concluir que una nueva estructura de Legendre (LS) está contenida en la SE no relativística [12]. Este hecho, que permite conectar ambos escenarios, ha dado a luz una serie de nuevos e importantes resultados [13-21]. Destacamos entre ellos, por su relación con la presente comunicación, la inferencia de un ansatz, en términos de cuadraturas, para la función de onda del estado fundamental de la SE con potenciales convexos pares [20]. La potencialidad predictiva del ansatz y el hecho que solo unos pocos modelos cuánticos admiten soluciones exactas, justifica explorar nuevas propiedades que pueden ser utilizadas para ampliar el rango de aplicabilidad a potencia les más generales. En esta comunicación mostramos el procedimiento a seguir cuando se relaja la condición que el potencial sea par.

2. Preliminares

La Medida de Información de Fisher

Revisaremos brevemente aquí el formalismo pertinente [5]. Considere un sistema especificado por un parámetro físico θ y sea $f(x,\theta)$ la función de distribución de probabilidades normalizada (PDF) para este parámetro. Si un observador hace una medida de x y dispone de la mejor manera de inferir θ desde esa medida, llamando a la estimación resultante $\tilde{\theta}=\tilde{\theta}(x)$, uno podría preguntarse qué tan bien pudo determinar θ. La Teoría de la Estimación [5] afirma que el *estimador óptimo* $\tilde{\theta}(x)$, después que se examinan un número muy grande de x-muestras, sufre un error medio cuadrático e^2 desde θ obedeciendo la regla $e^2 I=1$, donde I es la Medida de Información de Fisher (FIM), una funcional de la PDF, dada por

$$I=\int dx\ f(x,\theta)\left\{\frac{\partial}{\partial\theta}\ ln\left[f(x,\theta)\right]\right\}^2 . \tag{1}$$

Cualquier otro estimador debe tener mayor error medio cuadrático (los estimadores deben ser sosegados, es decir, deben satisfacer $\langle\tilde{\theta}(x)\rangle=\theta$). Así, la FIM tiene un límite inferior. No importa cuál sea el parámetro μ del sistema, I debe obedecer la llamada *cota de Cramer-Rao* [5]

$$I\,e_\mu^2\geq 1 \tag{2}$$

El caso particular de familias translacionales merece consideración especial. Estas son familias de distribución mono-paramétricas de la forma $f(x,\theta)=f(x-\theta),$ conocidas hasta el parámetro de desplazamiento θ. Todos los miembros de la familia presentan idéntica forma. Después de introducir la amplitud ψ tal que la PDF se expresa a través de $f=|\psi|^2$, la FIM para *sistemas invariantes por translación*, adopta el aspecto [5]

$$I=\int f(x)\left[\frac{\partial\, ln f(x)}{\partial x}\right]^2 dx=4\int\left|\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right|^2 dx\ ; \qquad f=|\psi|^2 . \tag{3}$$

Consideremos un sistema especificado por un conjunto de M parámetros físicos μ_k.

$$\mu_k=\langle A_k\rangle=\int dx\,A_k(x)f(x), \qquad k=1,\ldots,M. \tag{4}$$

El conjunto de los valores μ_k es considerado como el conocimiento previo (información empírica disponible). La PDF *físicamente relevante* minimiza la FIM condicionada al “conocimiento previo” (4) y a la condición de normalización $\int dx\ f(x)=1$. Consecuentemente, introduciendo (M+1)-multiplicadores de Lagrange λ_k ($\lambda_0=\alpha$), el problema de optimización

$$\delta\left(I-\alpha\int dx f(x)-\sum_{k=1}^{M}\lambda_k\int dx\,A_k(x)f(x)\right)=0, \tag{5}$$

conduce a una ecuación diferencial para la deseada $f(x)$ la cual, escrita en términos de la amplitud $\psi(x)$ es de la forma [8]

$$f(x)=|\psi(x)|^2 \quad\rightarrow\quad \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x)\right]\psi(x)=\frac{\alpha}{8}\psi(x), \qquad con\quad U(x)=-\frac{1}{8}\sum_{k=1}^{M}\lambda_k\,A_k(x), \tag{6}$$

y es interpretada como una Ecuación de Schrödinger (SE) para una partícula de masa unidad ($\hbar=1$) moviéndose en un *pseudo-potencial informacional efectivo* $U(x)$ en el cual el multiplicador de Lagrange asociado a la normalización juega el rol de un autovalor de energía ($E=\alpha/8$) y los λ_k son determinados por medio de la información disponible [8-11].

Para escenarios unidimensionales, $\psi(x)$ es real [22] y se tiene

$$I = \int \psi^2 \left(\frac{\partial \ln \psi^2}{\partial x} \right)^2 dx = 4 \int \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 dx = -4 \int \psi \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \, dx \tag{7}$$

Luego, usando las expresiones (6) y (7) se encuentra una simple y conveniente expresión para la FIM,

$$I = \alpha + \sum_{k=1}^{M} \lambda_k \langle A_k \rangle . \tag{8}$$

La conexión entre la FIM y la termodinámica fue establecida en términos de las típicas relaciones de reciprocidad (RR) de Legendre [5]. Estas constituyen el formal y esencial ingrediente termodinámico [23] y pueden ser re-derivadas '*a la Fisher'* escribiendo (8) en una forma que enfatice el rol de las variables independientes relevantes,

$$I(\langle A_1 \rangle, \ldots, \langle A_M \rangle) = \alpha + \sum_{k=1}^{M} \lambda_k \langle A_k \rangle . \tag{9}$$

La transformada de Legendre cambia la identidad de las variables independientes relevantes. Así, para el multiplicador de Lagrange α, que juega el rol de una autoenergía en (6), tenemos

$$\alpha(\lambda_1, \ldots, \lambda_M) = I - \sum_{k=1}^{M} \lambda_k \langle A_k \rangle . \tag{10}$$

Luego, desde estas preliminares, se encuentran de forma trivial, las tres RR

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \lambda_k} = -\langle A_k \rangle \; ; \qquad \frac{\partial I}{\partial \langle A_k \rangle} = \lambda_k \; ; \qquad \frac{\partial I}{\partial \lambda_i} = \sum_{k}^{M} \lambda_k \frac{\partial \langle A_k \rangle}{\partial \lambda_i} , \tag{11}$$

siendo la última una generalización del teorema de Euler.

La conexión entre la FIM y la mecánica cuántica emerge cuando el proceso variacional de la FIM da origen a una SE. Este hecho de suma importancia se emplea para ir mucho más allá de la termodinámica y permite construir intrigantes relaciones con celebrados teoremas de la mecánica cuántica [12-21]. En un escenario unidimensional, uno de los resultados más sorprendentes aparece cuando los teoremas de Hellmann-Feynman y del Virial, consecuencias fundamentales de la SE, pueden ser reinterpretados en términos de un tipo especial de relaciones de reciprocidad (RR) entre relevantes magnitudes físicas [12]. Estas RR son similares a las exhibidas por el formalismo de la termodinámica. Este hecho muestra que una nueva estructura de Legendre (LS) subyace en la SE no relativista [12].

La LS que subyace la SE conduce, en forma natural, a una ecuación diferencial parcial para la FIM [13]. Tal ecuación puede ser analíticamente resuelta. La solución codifica el *conocimiento previo* disponible sobre el sistema que nos ocupa, en términos de los valores esperados adecuadamente seleccionados [13]. Apelando a la cota de Cramer-Rao (2), es posible inferir la solución particular que conduce a la FIM extrema I_{min}. Así, dicha solución añade a la literatura sobre la FIM una expresión general, explícita para esa particular FIM extrema que surge del problema de optimización restringido, llenando así el 'gap' existente en la literatura de la Teoría de la Información (TI). Note que, una vez que se posee esta I_{min}, no es necesario realizar una optimización explícita ni resolver la SE asociada a la FIM.

Por otra parte, la conexión a través de la SE, entre la FIM y el teorema de Hellmann-Feynman permite inferir que muchos problemas cuánticos tienen asociada una FIM [14]. La LS subyacente en la SE permite obtener una ecuación diferencial de primer orden que los autovalores de energía deben necesariamente satisfacer [15]. De esta ecuación particular, se puede obtener una solución completa para las autoenergías de la SE. Apelando a la relación de Heisenberg (cota de Cramer-Rao en términos cuánticos), es posible inferir, sin resolver explícitamente la SE, la solución particular que conduce a las autoenergías. Cabe destacar que, en contraste con los estándar enfoques variacionales a la SE, el presente procedimiento no implica ningún parámetro libre[15]. La potencia predictiva de esta ecuación fue explorada en [16,17], donde el formalismo fue aplicado al oscilador anarmónico cuártico.

Por otra parte, el estudio del comportamiento de la teoría bajo transformaciones de escala, dio un poco de luz sobre las intrigantes relaciones entre la FIM y la SE. En ref. [18] se demuestra que la FIM, así como la relación de Cramer-Rao, surgen como una consecuencia directa de las propiedades de escala de la SE. En ref.[19] se investiga la transformación de escala de la FIM y se encuentra que importantes resultados de la mecánica cuántica se pueden derivar en forma directa desde la TI. En ambos casos, la conexión fue establecida mediante una transformada de Legendre.

Otra importante consecuencia de la subyacente LS es la formulación de un ansatz para la PDF, libre de parámetros, cuando el potencial interviniente es una función convexa par [20]. Por su directa conexión con la presente comunicación, ampliaremos este punto.

Ansatz para inferir la PDF cuando interviene un potencial convexo par

Cuando el potencial informacional es una función convexa par, una solución ansatz para la PDF puede ser derivada conectando la definición de la FIM con el teorema del Virial [20]. El procedimiento es el siguiente.

Para cualquier sistema cuántico en estado estacionario, descrito por una SE de la forma

$$\hat{H}\,\psi_n = E_n\,\psi_n\,, \qquad con \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + U(\vec{x}) \tag{12}$$

el teorema del Virial establece que [22]

$$\left\langle -\frac{\hbar^2}{m}\vec{\nabla}^2 \right\rangle = \left\langle \vec{x}\,.\,\vec{\nabla}U(\vec{x}) \right\rangle \tag{13}$$

donde los valores de expectación son tomados entre estados estacionarios del $\hat{H}$. Luego, en un escenario unidimensional, la FIM (7) puede ser expresada "virialmente" como

$$I = -4\left\langle \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\rangle = 4\left\langle x\frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle \,, \tag{14}$$

Esta relación, en el escenario Fisher, es dada por

$$\int dx\, f(x)\left(\frac{\partial\, \ln f(x)}{\partial x}\right)^2 = 4\int dx\, f(x)\, x\frac{\partial}{\partial x}U(x)\,, \tag{15}$$

Luego,

$$\int dx\, f(x)\left[\left(\frac{\partial\, \ln f(x)}{\partial x}\right)^2 - 4x\frac{\partial}{\partial x}U(x)\right] = 0. \tag{16}$$

Dado que para potenciales convexos pares se verifica que

$$\forall x \in Dom\,(U), \qquad x\frac{\partial}{\partial x}U(x) \geq 0. \tag{17}$$

se puede inferir, un ansatz f_A que, por construcción verifica (16). Simplemente se pide que

$$\left(\frac{\partial\, \ln f_A(x)}{\partial x}\right)^2 - 4\,x\frac{\partial}{\partial x}U(x) = 0. \tag{18}$$

de donde se obtienen dos soluciones independientes

$$f_A^{\pm}(x) = A\, exp\left(\pm 2\int dx\sqrt{x\frac{\partial}{\partial x}U(x)}\right), \tag{19}$$

siendo A una constante de integración. La ec. (19) proporciona una herramienta para construir un ansatz para la PDF.

En Ref.[20] este ansatz fue utilizado para tratar al oscilador armónico (HO) y al oscilador anarmónico cuártico (AHO). En el primer caso la solución-ansatz coincide con la solución exacta y en el segundo caso la aproximación es "muy buena".

3. Ansatz para inferir la PDF de potenciales convexos

El procedimiento presentado en la sección anterior trata con potenciales convexos pares [20]. La naturaleza del ansatz para la PDF deriva de la estructura informacional incorporada a través de las propiedades de Legendre. En esta sección se discuten nuevos aspectos que deben ser tenidos en cuenta y pueden ser utilizados para ampliar el rango de aplicabilidad de la técnica a potenciales más generales.

Potenciales convexos simétricos

El hecho que la conexión Fisher-Schrödinger surge en el proceso de optimización (condicionada) de la FIM sugiere que la expresión (18) es físicamente aceptable en un apropiado sistema referencial. Luego, se debe incorporar la información concerniente a los extremos del potencial. Si el potencial es convexo y se asume que alcanza su valor mínimo en el punto crítico $x_c = \xi$,

$$U'(\xi)=0 , \qquad U_{min}=U(\xi), \tag{24}$$

efectuamos una transformación de translación $u = x - \xi$. Denotando con barra las magnitudes referidas al nuevo referencial, el potencial y la PDF son dados por

$$\bar{U}(u) = U(u+\xi) = U(x) , \qquad \bar{f}(u)=f(u+\xi)=f(x), \tag{25}$$

Debido a la invariancia translacional de la FIM, $I = \bar{I}$, podemos expresarla virialmente como,

$$I=-4\left\langle \frac{\partial^2}{\partial u^2} \right\rangle = 4\left\langle u\frac{\partial \bar{U}}{\partial u} \right\rangle \quad \rightarrow \quad \int du \bar{f}(u)\left(\frac{\partial \ln \bar{f}(u)}{\partial u}\right)^2 = 4\int du \bar{f}(u)\, u\frac{\partial}{\partial u}\bar{U}(u) \tag{26}$$

Si $U(x)$ es un potencial convexo simétrico respecto de $x_c = \xi$, se tiene que en el nuevo referencial, $\bar{U}(u)$ es un potencial convexo par. Luego, se infiere el ansatz $\bar{f}_A$ que, por construcción, verifica (26). Simplemente se pide que

$$\left(\frac{\partial \ln \bar{f}_A(u)}{\partial u}\right)^2 = 4\, u\frac{\partial}{\partial u}\bar{U}(u) \tag{27}$$

y se obtienen dos soluciones independientes

$$\bar{f}_A^{\pm}(u)= A \exp\left(\pm 2\int du\sqrt{u\frac{\partial}{\partial u}\bar{U}(u)}\right) , \tag{28}$$

siendo A una constante de integración. Si regresamos al referencial original mediante la transformación $x = u + \xi$, obtenemos

$$f_A^{\pm}(x)= A \exp\left(\pm 2\int dx\sqrt{(x-\xi)\frac{\partial}{\partial x}U(x)}\right) \tag{29}$$

La ec.(29) proporciona una herramienta para construir un ansatz para la PDF relatada a *potenciales convexos simétricos* respecto del punto crítico $x_c = \xi$.

Las consideraciones citadas en esta sección, aplicadas a versiones trasladadas del oscilador armónico (HO) y del oscilador anarmónico cuártico (AHO) permiten obtener exitosos resultados, comparables a aquellos obtenidos en [20] para tratar al HO y al AHO.

Potenciales convexos no-simétricos

Cuando el potencial es simétrico, es de esperar que la PDF sea simétrica y presente su valor máximo donde el potencial es mínimo. Este concepto intuitivo nos permite aceptar de forma natural la relación local (27) e inferir el ansatz. Cuando el potencial no es simétrico, la (27) no es aceptable. La propuesta ahora, es introducir un potencial efectivo $U_{ef}(x)$ y seguir el procedimiento indicado en la sección anterior. Luego si U_{ef} alcanza el mínimo absoluto en $x = \eta$, tenemos

$$f_A^{\pm}(x) = A\, exp\left(\pm 2\int dx \sqrt{(x-\eta)\frac{\partial}{\partial x}U_{ef}(x)} \right) \tag{33}$$

Si se dispone de información adicional del sistema en estudio, es posible proponer un adecuado U_{ef} y utilizar (33) para construir un ansatz para la desconocida PDF.

4. Conclusiones

A partir de la conexión Fisher-Schröedinger es posible obtener un ansatz, libre de parámetros, para la función de distribución de probabilidades cuando intervienen potenciales convexos simétricos. En relación a los potenciales convexos no-simétricos, la potencialidad de la técnica está sujeta a una conveniente elección del potencial efectivo, estando así limitada a situaciones para las que se disponga de una conveniente información adicional. Esperamos que la estructura de Legendre subyacente en la teoría nos revele el camino a seguir para que desde la conocida asimetría se pueda generar un apropiado potencial efectivo. Estamos trabajando en esta línea.

Finalmente, destaquemos que, una vez que se dispone de un ansatz para la función de distribución de probabilidades, se dispone de un ansatz para la autofunción del estado fundamental de la asociada ecuación de Schröedinger. Sin duda, los resultados presentados aquí permitirán que muchos profesionales, no familiarizados con la teoría cuántica, puedan utilizar esta poderosa herramienta para abordar situaciones en las distintas áreas del conocimiento.

Bibliografía

1. L. Brillouin, *Science and information theory* (Academic, New york, 1956).
2. E. T. Jaynes. Phys. Rev. **106** (1957) 620–630.
3. A. Katz, A. Principles of Statistical Mechanics: The Information Theory Approach; Freeman and Co.: San Francisco, CA, USA, 1967.
4. B. R. Frieden. Phys. Rev. A **41** (1990) 4265–4276.
5. B. R. Frieden, *Science from Fisher Information: A Unification* (Cambridge, University Press; Cambridge,2004).
6. B. R. Frieden; B. H. Soffer Phys. Rev. E 1995, 52, 2274–2286. Entropy **13** (2011) 194
7. M. Reginatto, Phys. Rev. E **58** (1998)1775.
8. B. R. Frieden, A. Plastino, A. R. Plastino, B. H. Soffer, Phys. Rev. E **60** (1999) 48-53.
9. S. P. Flego, A. Plastino and A.R. Plastino: Condensed Matter Theories 18. Nova Science Publishers. Inc.USA.(2003) 245-258, and ref. cited therein.
10. S. P. Flego, B. R. Frieden, A. Plastino, A. R. Plastino, B. H. Soffer, Phys. Rev. E **68** (2003) 016105.
11. S. P. Flego, F. Olivares, A. Plastino and M. Casas. Entropy, **13** (2011) 184
12. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino, Physica A **390** (2011) 2276-2282.
13. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino, Physica A **390** (2011) 4702-4712.
14. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino, Ann. Phys. (N.Y.) **326** (2011) 2533-2543.
15. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino, J. Math. Phys. **52** (2011) 082103.
16. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino, J. Modern Phys. **2** (2011) 1390.
17. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino. IRJPC **2** (1) (2011) 25-54.
18. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino. Entropy **13** (2011)2049-2058.
19. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino: Cent. Eur. J. Phys. **10**(2) (2012) 390-397.
20. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino, Phys. Scr. **85** (2012) 055002(7pp).
21. A. Plastino, A. R. Plastino, M. Casas, S. P. Flego. Nova Science Publishers, New York, USA (2012, 1st quarter) and ref. cited therein..
22. W. Greiner and B. Müller, *Quantum mechanics. An Introduction.* (Springer, Berlin, 1988).
23. A. Desloge , *Thermal Physics* (Holt, Rinehart and Winston, New York, 1968).