



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

SZAKDOLGOZAT

Konczer József

Fisher-információ a kvantumelméletben

Témavezető: Prof. Petz Dénes
BME Matematika Intézet,
Analízis Tanszék

Belső konzulens: Prof. Szunyogh László
BME Fizika Intézet,
Elméleti Fizika Tanszék

2010

Szakdolgozat kiírása

A klasszikus Fisher-információ a statisztikában jelent meg és ott alapvető fogalom. A szakdolgozat a kvantumelméleti kiterjesztéssel foglalkozik kvantumstatisztikai es állapotbecslési alkalmazásokkal. A szakdolgozati téma célja betekintést nyújtani az új tudományterület legfontosabb eredményeibe. Konkrétan az egyik fő cél az ún. Cramér-Rao egyenlőtlenség áttekintése és esetleges különbség tétel a kvantum Fisher-információk változatai között.

Önállósági nyilatkozat

Alulírott Konczer József, a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem hallgatója kijelentem, hogy szakdolgozatomat a témavezetőm irányítása mellett önállóan, meg nem engedett segédeszközök nélkül készítettem. Amennyiben mások munkáját felhasználtam, azt mindig a forrás megjelölésével tettem.

Budapest, 2010. június 7.

.....
Konczer József

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	1
1.1. Valószínűségszámítás és statisztika	1
1.1.1. Történelmi összefoglaló	1
1.1.2. Valószínűségszámítás alapfogalmai, és axiómái	1
1.1.3. Matematikai statisztika	2
1.1.4. Relatív gyakoriság és nagy számok törvénye	2
1.1.5. Paramétertől függő valószínűségi mérték	4
1.1.6. Eloszlás entrópiája	4
1.2. Kvantummechanika axiómái	5
1.2.1. Hilbert-háló	11
1.2.2. Sűrűségmátrix Neumann entrópiája	13
2. Fisher-információ a klasszikus valószínűségszámításban	13
2.1. Cramér-Rao egyenlőtlenség	13
2.2. Két állapotú rendszer Fisher-információja	16
2.3. Fisher-információ és entrópia	16
3. Fisher-információ a kvantummechanikában	17
3.1. Fisher-információ bevezetése	
Neumann-entrópia alapján	25
4. $1/2$ spinű részecske állapotának becslése	27
4.1. Kubo-Mori-féle Fisher-információ	33
5. További kutatási lehetőségek	34

1. Bevezetés

1.1. Valószínűesszámitás és statisztika

1.1.1. Történelmi összefoglaló

Valószínűesszámitás és a matematikai statisztika ún. véletlen tömegjelenségekkel foglalkozik. Ezek olyan jelenségek, melyek esetén a pontos ok-okozati összefüggéseket nem tudjuk, de az egyes ún. valószínűségi változókat megadó kísérleteket elvben tetszőleges sokszor megismételhetjük. Valószínűségi számításokat már a XVII. században végeztek. Pascal és Fermat ezidőben szerencsejátékokra vonatkozó problémákat vetettek fel, és oldottak meg. Magának a valószínűségnek a fogalmát Bernoulli vezette be, a relatív gyakorisággal azonosítva azt.

A valószínűesszámitás mai, axiomatikus megfogalmazását először 1933-ban Kolmogorov adta. Ebben a felépítésben egy kísérlet lehetséges kimeneteleinek halmaza egy Ω alaphalmaz, az *események* (melyek valószínűségéről beszélhetünk), pedig ezen alaphalmaz *részalmazai*, vagy azoknak egy része. A valószínűség ebben a konstrukcióban egy 1-re normált mérték, mely az egyes eseményekhez rendel valószínűségi mértéket.

1.1.2. Valószínűesszámitás alapfogalmai, és axiómái

Az események halmazát az alaphalmaz (Ω) részalmazainak egy ún. σ -algebrát alkotó rendszerével reprezentáljuk, melyet \mathcal{F} -el jelölünk.

Def.: Egy \mathcal{F} halmazrendszer σ -algebrát alkot, ha:

- $\Omega \in \mathcal{F}$
- ha $E \in \mathcal{F} \Rightarrow E^C \in \mathcal{F}$
- ha $\forall i \in I, E_i \in \mathcal{F}$, I legfeljebb megszámlálható, akkor $\bigcup_{i \in I} E_i$ is eleme \mathcal{F} -nek

A valószínűség ebben az axiomatikus felépítésben egy mérték Ω -n, az alábbi tulajdonságokkal:

Def.: Egy $\text{Pr} : \mathcal{F} \mapsto \mathbb{R}^+$ leképzés valószínűségi mérték, ha:

- Egyre normált: $\Pr(\Omega) = 1$
- σ -additív: minden legfeljebb megszámlálható I indexhalmazra,

$$\Pr\left(\bigcup_{i \in I} E_i\right) = \sum_{i \in I} \Pr(E_i)$$
 ha E_i -k páronként diszjunktak.

Minden Ω alaphalmaz esetén $\mathcal{P}(\Omega)$, azaz az alaphalmaz összes részhalmazainak rendszere σ -algebrát alkot. Ezzel a választással élve viszont folytonos esetben, mikor pl. $\Omega = [0, 1]$ halmaz, nem vezethető be ellentmondás mentesen olyan – fizikailag természetes – mérték, mely minden intervallumhoz az intervallum hosszát rendeli. Hogy ilyen mérték definiálható legyen a számegyenesen, tekintsük például csak a nyílt intervallumok által generált¹ σ -algebrába tartozó ún. Borel halmazokat (\mathcal{B}) mérhetőnek.

1.1.3. Matematikai statisztika

Az axiomatikus felépítésű valószínűség elméletben *statisztikának* nevezzük az összes $t : \Omega \mapsto \mathbb{R}$ mérhető függvényt². Az egyes statisztikák várható értékei különböző valószínűségi mértékek esetén az alábbi integrállal adható meg (ξ jelöli a valószínűségi változót):

$$E[t(\xi)] = \int_{\Omega} t(x) d\mu(x) \quad (1)$$

ahol μ reprezentálja a ξ -hez tartozó valószínűségi mértéket.

Leggyakrabban használt statisztikák $\Omega = \mathbb{R}$ valós valószínűségi változókra a várható érték (E), és a szórásnégyzet (D^2):

$$E[\eta] = \int_{\mathbb{R}} y d\nu(y)$$

$$D^2[\eta] = \int_{\mathbb{R}} (y - E[\eta])^2 d\nu(y)$$

ahol ν az η valószínűségi változóhoz tartozó valószínűségi mérték.

1.1.4. Relatív gyakoriság és nagy számok törvénye

Egy esemény valószínűsége kísérletileg akkor ellenőrizhető, ha módunkban áll sok azonos eloszlású³ független rendszeren ellenőrizni az adott esemény bekövetkezését. Ekkor

¹általános metrikus térben a nyílt gömbök által generált σ -algebra

²az egyszerűség kedvéért gyakran használunk \mathbb{R}^N vagy $\mathbb{R}^{N \times M}$ értékű statisztikákat is

³azonos módon előállított

az esemény valószínűsége és bekövetkezésének relatív gyakorisága szoros kapcsolatban áll, olyannyira, hogy történelmileg először a valószínűséget éppen a relatív gyakorisággal definiálták. A két mennyiséget az ún. nagy számok törvénye köti össze:

Ha egy E esemény valószínűsége p akkor n darab független, azonos eloszlású rendszerben az E esemény bekövetkezésének száma legyen χ valószínűségi változó. Ekkor χ eloszlása éppen $\text{Binom}(n, p)$. Ennek eloszlása:

$$\Pr\{\chi = k\} = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$$

Tétel: (Bernoulli nagy számok törvénye) Ha $\chi \sim \text{Binom}(n, p)$ akkor

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \Pr \left\{ \left| \frac{\chi}{n} - p \right| > \varepsilon \right\} = 0 \quad (2)$$

Tétel: (Csebisev-egyenlőtlenség) Ha egy ξ valós valószínűségi változó várható értéke $E[\xi]$, és szórása $D[\xi]$ létezik, és véges, akkor:

$$\Pr\{|\xi - E[\xi]| > \varepsilon\} \leq \frac{D^2[\xi]}{\varepsilon^2} \quad (3)$$

Ha $\xi = \frac{\chi}{n}$ választással élünk akkor $E[\xi] = p$ és

$$D^2[\xi] = \frac{D^2[\chi]}{n^2} = \frac{n \cdot p \cdot (1-p)}{n^2} = \frac{p \cdot (1-p)}{n}.$$

Így, ha $\chi \sim \text{Binom}(n, p)$ akkor:

$$\Pr \left\{ \left| \frac{\chi}{n} - p \right| > \varepsilon \right\} \leq \frac{p \cdot (1-p)}{\varepsilon^2 \cdot n} \quad (4)$$

Azaz annak a valószínűsége hogy egy esemény relatív gyakorisága az esemény valószínűségétől adott mértékben eltérjen, a független kísérletek számával fordított arányban csökken.

Tehát egy esemény valószínűségi modellből jóslott valószínűségével jól becsülhető nagyszámú független kísérletből kapott esemény relatív gyakorisága.

1.1.5. Paramétertől függő valószínűségi mérték

A gyakorlatban sokszor előfordul, hogy egy fizikailag mérhető mennyiség eloszlására egy vagy több ismeretlen paraméter erejéig jóslatot tudunk tenni. Ekkor mérések alapján valamilyen módszerrel megpróbáljuk megbecsülni az eloszlás ismeretlen paramétereit. Az egyszerűség kedvéért itt csak ún. reguláris becslési problémákkal foglalkozunk [6].

Def.: Egy eloszlást reprezentáló mérték regulárisan függ egy paramétertől, ha létezik egy olyan a paraméter szerint egyszeresen folytonosan differenciálható, mindenhol pozitív függvény, és egy μ_0 mérték, hogy a paramétertől függő mérték előállítható e kettő szorzataként:

$$d\mu(\theta)(\underline{x}) = f(\underline{x}, \theta) \cdot d\mu_0(\underline{x}) \quad (5)$$

$$f(\underline{x}, \theta) > 0, \quad \forall \underline{x}\text{-re } \frac{\partial f(\underline{x}, \theta)}{\partial \theta} \in C^0 \quad (6)$$

Példa nem-reguláris becslési problémára a $(0, \theta)$ intervallumon egyenletes eloszlás.

1.1.6. Eloszlás entrópiája

Főként termodinamikai megfontolásokból bevezethető tisztán diszkrét, vagy tisztán folytonos eloszlások entrópiája.

Def.:

Diszkrét esetben ez az ún. Shannon-entrópia:

$$S(\underline{p}) = - \sum_i p_i \cdot \log(p_i) \quad (7)$$

Folytonos esetben pedig az ún. Boltzmann-Gibbs-entrópia:

$$S(f(\underline{x})) = - \int \log(f(\underline{x})) \cdot f(\underline{x}) d\underline{x} \quad (8)$$

1.2. Kvantummechanika axiómái

A XX. század elején a természetben olyan jelenségeket figyeltek meg, és vizsgáltak⁴, melyek ellentétben álltak az addig kifarrott fizikai elméletekkel. Az empirikus ismeret anyag összefoglalására mindazonáltal egy egyre általánosabb matematikai struktúra jött létre (mely alapfeltételezései távol állnak a körülöttünk megszokott viszonyoktól). Az elmélet első átfogó matematikai formalizálása a Heisenberg-féle mátrixmechanika volt, melyet követett a Shrödinger által kidolgozott hullámmechanika. A ma is használt általános formalizmus kidolgozása Neumann János nevéhez fűződik, aki 1932-ben megjelent könyvében⁵ a kvantummechanika matematikai formalizmusát a funkcionál analízisre alapozta. A kvantummechanika ebben a formalizmusban felírt axiómái a következők:

(A0) Minden kvantummechanikai rendszerhez tartozik egy szeparábilis Hilbert-tér (\mathcal{H}).

Hilbert-tér egy olyan komplex *vektortér*, melyben értelmezve van egy $\mathcal{H} \times \mathcal{H} \mapsto \mathbb{C}$ *skalár szorzat*. Ezen kívül egy Hilbert-tér a skalár szorzatból származtatott normára nézve Banach-tér is, azaz ebben a normában teljes. (Egy Hilbert-tér dimenziójára nincs kikötés.) A szeparabilitás azt jelenti, hogy létezik a vektortérnek legfeljebb megszámlálható bázisa.

(AI) Egy kvantummechanikai rendszer állapotai a hozzá tartozó Hilbert-tér sugaraival reprezentálhatóak.

A Hilbert-tér sugarainak a $\mathcal{H} \setminus \{0\}$ tér \sim ekvivalencia reláció szerint lefaktorizált faktortérének elemeit mondjuk. $\psi \sim \phi \Leftrightarrow \exists \lambda \in \mathbb{C}; \psi = \lambda \cdot \phi$

(AII) A mérhető fizikai mennyiségeket önadjungált lineáris operátorokkal reprezentáljuk.

(AIII) Egy mérhető fizikai mennyiség mérése során felvett lehetséges értékei a mennyiséghez rendelt lineáris operátor *spektrumának* (σ_A) elemei. Legyen az \mathfrak{A} fizikai mennyiséghez rendelt operátor A ekkor mivel A önadjungált, a spektrál tétel[1] alapján A előállítható egy projektor értékű mérték szerinti integrálként.

$$A = \int_{\sigma_A} \lambda dE(\lambda)$$

⁴pl. feketetest-sugárzás

⁵melynek magyar nyelvű fordítása [5]

Ha az operátor nem korlátos, akkor az operátor értelmezési tartománya:

$$\mathcal{D}_A = \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \int_{\sigma_A} \lambda^2 d\langle \psi | E(\lambda) \psi \rangle \in \mathbb{R} \right\}$$

Annak a valószínűsége hogy az \mathfrak{A} fizikai mennyiség mérése során az értéke (α) egy Δ halmazba esik:

$$\Pr(\alpha \in \Delta) = \int_{\Delta} \langle \psi | dE(\lambda) \psi \rangle$$

(AIV) Egy fizikai mérés folyamán a mért fizikai mennyiség értéke véletlenszerűen adódik a mérésnek megfelelő operátor spektrumából, majd az állapot rávetül (vagy „beugrik”) a mért értékhez (vagy intervallumhoz) tartozó projektor képterére.

$$\psi' = \frac{P_{\Delta} \psi}{\|P_{\Delta} \psi\|}$$

(AV) Összetett rendszer állapota a komponenseit leíró Hilbert-terek tenzor szorzata által létrehozott Hilbert-tér egy sugarával reprezentálható. két rendszer esetén:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2^6$$

A kvantummechanika a mérések kimeneteléről csak sztochasztikus állításokat tesz, ezért hogy ezek a nagy számok törvénye alapján valamelyest ellenőrizhetőek legyenek, az egyes kvantummechanikai rendszerekből képesnek kell lennünk több, független azonosat előállítani. A rendszerek kvantummechanikai tárgyalásában igyekszünk a lehető „legkauzálisabb” rendszerekkel dolgozni, azaz olyanokkal ahol az egyes fizikai mérések sztochasztikus viselkedése a lehető legkisebb mértékű. A tapasztalat, és ehhez igazodva a kvantummechanika axiómái is előírnak egyfajta megkerülhetetlen sztochasztikus viselkedést.

A kvantummechanikai rendszerről első közelítésben feltételezzük, hogy ún. tiszta állapotban van. Ez azt jelenti, hogy a rendszeren végezhető olyan (nem triviális) mérés, melynek kimenetele nem sztochasztikus.

Az ilyen tiszta állapotok előállítása talán könnyebb, mint azonosításuk, ugyanis (AIV) alapján ha egy rendszeren olyan mérést végzünk, melynek spektrálfelbontásában van

⁶A skalár szorzat a tenzorszorzat térben: $\langle \psi_1 \otimes \psi_2 | \phi_1 \otimes \phi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \phi_1 \rangle \langle \psi_2 | \phi_2 \rangle$

egyrangú projekció, akkor az ehhez a projekcióhoz tartozó kimenetel esetén a mérés utáni megmért rendszerek egy tiszta állapotban lévő Gibbs sokaságot alkotnak [5].

Ha a kvantummechanikai állapot leírásában valamiképpen figyelembe szeretnénk venni, hogy nem teljesen ismerjük a rendszer előállításának módját, akkor azt tételezhetjük fel, hogy a rendszer p_i valószínűséggel van ψ_i (tiszta) állapotban (az egyes valószínűségek összege 1). Ebben az esetben a mérhető fizikai mennyiségek várható értékének számolása megkönnyítése érdekében bevezethető egy ún. statisztikus operátor, mely az alábbi módon állítható elő:

$$D = \sum_{i \in I} p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$$

Az így bevezetett statisztikus operátor csak kényelmi okokat szolgál, viszont ha megvizsgáljuk hogy egy összetett rendszer részrendszere milyen állapotban van, azt tapasztaljuk, hogy létezik olyan tiszta állapotban lévő rendszer, melynek részrendszere nem jellemezhető egyrangú statisztikus operátorral. Ez az eset minőségileg más ahhoz képest, mikor az elvileg megismerhető körülmények bizonytalanságát figyelembe véve vezettük be a statisztikus operátort, ugyanis ez esetében általunk nem befolyásolható (nem csökkenthető) módon jelenik meg véletlenszerűség a rendszerben. Ez motiválja, hogy a rendszereket ezentúl ne egy vektorral, hanem egy statisztikus operátorral jellemezzünk. Ez a leírásmód tartalmazza a tiszta állapotok határesetét is. Ekkor a rendszert leíró statisztikus operátor egy egy-rangú projekció.

A statisztikus operátor tulajdonságai a 1.2. képlet alapján levezethetők, mégis mivel a statisztikus operátorok sokkal általánosabban jellemzik a rendszert, tulajdonságait rögzítjük:

Def.: egy $D \in B(\mathcal{H})$ statisztikus operátor, ha rendelkezik az alábbi tulajdonságokkal:

$$D \geq 0^8 \quad \text{Tr } D = 1 \quad (9)$$

⁷Az I indexhalmaz lehet véges, de megszámlálhatóan végtelen is.

⁸Ennek következménye hogy D önadjungált

Állítás: Bármely D statisztikus operátorral jellemzett összetett rendszer részrendszere teljes mértékben jellemezhető egy D_1 statisztikus operátorral:

Mivel a kvantumrendszerek állapotairól csak mérések során kaphatunk információt, a fenti állítás azt mondja, hogy bármely a részrendszeren végzett mérés eredménye a redukált statisztikus operátor(D_1) segítségével megadható.

Nézzük hogy reprezentálható az egész rendszert leíró Hilbert-téren egy olyan mérés, mely csak az egyik részrendszeren végzett mérést reprezentál:

$$A_1 = A \otimes I \quad (10)$$

A fenti állítás tehát a következő tétellel azonos:

Tétel: Minden $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ téren ható D statisztikus operátorhoz tartozik egy \mathcal{H}_1 -en ható D_1 statisztikus operátor, melyre igaz, hogy

$$\forall A \in B(\mathcal{H}_1) \quad \text{Tr } DA_1 = \text{Tr } D_1 A \quad (11)$$

Bizonyítás: Tekintsük először azt az esetet, mikor az összetett rendszer tiszta állapotban van. Legyen ekkor a rendszer állapotát reprezentáló vektor: $\Psi \in \mathcal{H}$. Fejtsük ki Ψ -t \mathcal{H}_1 és \mathcal{H}_2 bázisainak tenzor szorzatában:

$$\Psi = \sum_{i,j} w_{ij} \xi_i \otimes \eta_j \quad (12)$$

Legyen E^{kl} a \mathcal{H}_1 térbeli mátrix egység, melynek (k, l) eleme 1, a többi pedig 0.

$$E_{ij}^{kl} = \delta_i^k \delta_j^l \Rightarrow E^{kl} \xi_u = \delta_{lu} \xi_k \quad (13)$$

Nézzük ennek hatását az összetett rendszerre:

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | (E^{kl} \otimes I) \Psi \rangle &= \langle \sum_{i,j} w_{ij} \xi_i \otimes \eta_j | (E^{kl} \otimes I) \sum_{u,v} w_{uv} \xi_u \otimes \eta_v \rangle \\
&= \sum_{i,j} \sum_{u,v} \bar{w}_{ij} w_{uv} \langle \xi_i \otimes \eta_j | (E^{kl} \otimes I) \xi_u \otimes \eta_v \rangle \\
&= \sum_{i,j} \sum_{u,v} \bar{w}_{ij} w_{uv} \langle \xi_i | E^{kl} \xi_u \rangle \langle \eta_j | \eta_v \rangle \\
&= \sum_{i,j} \sum_{u,v} \bar{w}_{ij} w_{uv} \delta_{lu} \langle \xi_i | \xi_k \rangle \delta_{jv} \\
&= \sum_{i,j} \sum_{u,v} \bar{w}_{ij} w_{uv} \delta_{lu} \delta_{ik} \delta_{jv}
\end{aligned}$$

$$\langle \Psi | (E^{kl} \otimes I) \Psi \rangle = \sum_v \bar{w}_{kv} w_{lv} \quad (14)$$

Azaz bevezetve $W_{ij} = w_{ij}$ mátrixot:

$$\langle \Psi | (E^{kl} \otimes I) \Psi \rangle = \text{Tr } E^{kl} W^* W \quad (15)$$

Mivel $W^* W$ mindenképpen pozitív, és

$$\text{Tr } W^* W = \sum_{ij} \bar{w}_{ij} w_{ij} = \|\Psi\|^2 = 1 \quad (16)$$

Így $D_1 = W^* W$ valóban egy sűrűség mátrix. Mivel a mátrix egységek bázist alkotnak a lineáris operátorok terén, D_1 -re érvényes hogy:

$$\forall A \in B(\mathcal{H}_1) \quad \text{Tr } |\Psi\rangle\langle\Psi| (A \otimes I) = \text{Tr } D_1 A \quad (17)$$

Mivel az összetett rendszerbeli kevert állapotok is előállíthatók egyrangú projekciók összegeként:

$$D = \sum_i p_i |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i| \quad (18)$$

Ilyen esetben is megtalálhatók a megfelelő redukált sűrűség mátrixok:

$$D_1 = \sum_i p_i W_i^* W_i \quad (19)$$

□

A levezetés minimális megváltoztatásával az is megkapható, hogy tiszta állapotban a második részrendszerre vonatkozó redukált statisztikus operátor: $D_2 = (WW^*)^T$. (Praktikusan a sűrűség mátrixok redukáltjainak számolására a parciális trace egy egyszerű és gyors módszer.)

Mivel így a rendszer leírása kissé megváltozik, kényelmi szempontból megváltoztatjuk az axiómákat:

(A0') Minden Kvantummechanikai rendszerhez tartozik egy szeparábilis Hilbert-tér (\mathcal{H}).

(AI') Egy kvantummechanikai rendszer állapotai a hozzá tartozó Hilbert-téren ható statisztikus operátorokkal reprezentálhatók.

(AII') A mérhető fizikai mennyiségek önadjungált lineáris operátorokkal reprezentálhatók.

(AIII') Egy mérhető fizikai mennyiség mérés során felvett lehetséges értékei a mennyiséghez rendelt lineáris operátor spektrumának elemei. Annak a valószínűsége, hogy egy mérhető fizikai mennyiség értéke (α) mérés során egy Δ tartományba esik:

$$\text{Pr}(\alpha \in \Delta) = \text{Tr} \left(D \int_{\Delta} dE(\lambda) \right)^9$$

(AIV') Egy fizikai mérés folyamán a mért fizikai mennyiség értéke véletlenszerűen adódik a mérésnek megfeleltetett operátor spektrumából, majd az állapot rávetül (vagy „beugrik”) a mért értékhez tartozó projektor képterére.

$$D' = \frac{P_{\Delta} D P_{\Delta}}{\text{Tr} D P_{\Delta}}$$

(AV') Összetett rendszer állapota a komponenseit leíró Hilbert-terek tenzorszorzatából alkotott Hilbert-téren ható statisztikus operátorral reprezentáljuk. Két rendszer esetén:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2^{10}$$

⁹ahol $\int_{\sigma_A} \lambda dE(\lambda)$ A spektrális felbontása

¹⁰A skalár szorzat a tenzorszorzat térben: $\langle \psi_1 \otimes \psi_2 | \phi_1 \otimes \phi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle$

1.2.1. Hilbert-háló

A kvantummechanikai és a klasszikus valószínűségszámítás között számos párhuzam vonható: A kvantummechanikában az klasszikus eloszlást a sűrűségmátrix reprezentálja, a klasszikus esetben pedig az alaphalmaz részhalmazáival reprezentált eseményeket a kvantummechanikában projekciók helyettesítik¹¹.

A klasszikus valószínűség elméletben bizonyos események között bevezethető egy rendezési reláció.

$$E \leq F \Leftrightarrow E \subset F \quad (20)$$

Vagy algebrailag:

$$E \leq F \Leftrightarrow E \cap F = E \quad (21)$$

Azaz egy E halmazzal reprezentált esemény akkor kisebb F halmazzal reprezentált eseménynél, ha E bekövetkezése minden esetben maga után vonja F bekövetkezését. Az események erre a rendezésre nézve ún. Háló struktúrával rendelkeznek, mely azt jelenti hogy létezik az események között egy parciális rendezés, vagyis bármely két eseményhez található egy legkisebb mindkettőnél nagyobb, és egy legnagyobb mindkettőnél kisebb esemény. Halmazok esetén:

$$\text{Sup}(E, F) = E \cup F \quad \text{Inf}(E, F) = E \cap F \quad (22)$$

Hasonló struktúra a kvantummechanikában az események reprezentálására használt projekciók között is lehetséges. P és Q projekciók esetén:

$$P \leq Q \Leftrightarrow \text{Rng}(E) \subset \text{Rng}(F) \quad (23)$$

Algebrailag:

$$P \leq Q \Leftrightarrow QP = PQ = P \quad (24)$$

A projekciók halmazán is bevezethető egy háló struktúra, ezt nevezzük Hilbert-hálónak. Azt a legkisebb projekciót mely P és Q projekciónál is nagyobb $P \vee Q$ -val, azt a legnagyobb projekciót mely mindkettőnél kisebb pedig $P \wedge Q$ -val jelöljük.

¹¹egy P operátor projekció, ha $P^2 = P^* = P$

$$\text{Rng}(P \vee Q) = \text{span}(\text{Rng}(P) \cup \text{Rng}(Q)) \quad (25)$$

$$\text{Rng}(P \wedge Q) = \text{Rng}(P) \cap \text{Rng}(Q) \quad (26)$$

Mivel a projekciók és azok képtere között egy-egyértelmű kapcsolat van, a fent leírt definíciók is egyértelműen meghatározzák $P \vee Q$ és $P \wedge Q$ projekciókat. Ezen projekcióknak azonban van egy másfajta, alakjuk is:

$$P \wedge Q = \prod_{i=1}^{\infty} PQ \quad (27)$$

Ennek az alaknak van egy szemléletes jelentése: Egy D sűrűségmátrix esetén $P \wedge Q$ projekció által reprezentált esemény akkor következik be, ha ugyan azon a rendszeren mérjük P és Q projektorok által reprezentált eseményeket egymás után felváltva, és azok mindegyike bekövetkezik.¹²

A projekciók esetében is érvényes egy De Morgan szerű azonosság (ebben az esetben a komplementeknek az ortogonális komplementum felel meg¹³).

$$(P \vee Q)^{\perp} = P^{\perp} \wedge Q^{\perp} \quad (28)$$

Így

$$P \vee Q = \left(\prod_{i=1}^{\infty} P^{\perp} Q^{\perp} \right)^{\perp} \quad (29)$$

Szavakkal: Egy D sűrűségmátrix esetén $P \vee Q$ projekció által reprezentált esemény akkor nem következik be, ha ugyan azon a rendszeren mérjük P és Q projektorok által reprezentált eseményeket egymás után felváltva, és azok egyike sem következik be.

A fő különbség a halmazok által reprezentált klasszikus és a projekciók által reprezentált kvantum eseményháló között, hogy az utóbbi nem disztributív:

Míg halmazokra:

$$E \cap (F \cup G) = (E \cap F) \cup (E \cap G) \quad (30)$$

$$E \cup (F \cap G) = (E \cup F) \cap (E \cup G) \quad (31)$$

¹² $P \wedge Q = \lim_{n \rightarrow \infty} (PQP)^n$ egy ekvivalens definíció, melyből egyszerűen látszik a határérték létezése

¹³ez projekciókra speciálisan: $P^{\perp} = I - P$

Ez projekciókra általánosan nem igaz:

$$P \wedge (Q \vee R) \neq (P \wedge Q) \vee (P \wedge R) \quad (32)$$

$$P \vee (Q \wedge R) \neq (P \vee Q) \wedge (P \vee R) \quad (33)$$

Bár ez mutatja hogy egy kvantummechanikai eseményháló nem disztributív, valamiféle kapcsolat mégis van az események között. Az esemény háló ezen tulajdonsága az ún. ortomodularitás:

$$P \leq Q \Rightarrow Q = P \vee (P^\perp \wedge Q) \quad (34)$$

Ez egy fajta korlátozott disztributivitásnak felel meg.

1.2.2. Sűrűségmátrix Neumann entrópiája

Termodinamikai megfontolásokból (a klasszikus eloszlásokhoz hasonlóan) sűrűségmátrixokhoz is definiálható entrópia. Ha egy D sűrűségmátrix egy rangú ortogonális projekciókra való felbontása:

$$D = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$$

Akkor a sűrűség mátrix Neumann entrópiája:

$$S(D) = - \sum_i p_i \log(p_i) \quad (35)$$

Vagy ekvivalens módon:

$$S(D) = -\text{Tr } D \log(D) \quad (36)$$

2. Fisher-információ a klasszikus valószínűségszámításban

2.1. Cramér-Rao egyenlőtlenség

A Cramér-Rao egyenlőtlenség központi szerepet tölt be a klasszikus valószínűségszámításban belül a paraméter becslések körében. Az egyenlőtlenség alsó korlátot szab az

egyes becslendő paraméterek szórására, de az ezt elérni képes ún. efficiens statisztikák alakjára is következtethetünk általa [6], [9].

Tétel: Tegyük fel, hogy van egy θ paramétertől *regulárisan* függő valószínűségi eloszlásunk $(\xi(\theta))$, melyhez tartozó valószínűségi mérték $\mu(\theta)$. Továbbá tegyük fel, hogy létezik legalább egy torzítatlan t statisztika:

$$E[t(\xi(\theta))] = \theta \quad (37)$$

Ekkor érvényes az alábbi Cramér-Rao egyenlőtlenség:

$$D^2[\tilde{\theta}] \geq \frac{1}{F(\theta)} \quad (38)$$

Ahol $\tilde{\theta}$ a paraméter becslt értéke¹⁴, $F(\theta)$ pedig az ún Fisher-információ.

$$F(\theta) = \int \left(\frac{\partial f(\underline{x}, \theta)}{\partial \theta} \cdot \frac{1}{f(\underline{x}, \theta)} \right)^2 d\mu(\theta)(\underline{x}) \quad (39)$$

Bizonyítás: A t statisztika torzítatlan:

$$\int t(\underline{x}) d\mu(\theta)(\underline{x}) = \theta \quad (40)$$

$\mu(\theta)$ a paramétertől regulárisan függ, azaz:

$$d\mu(\theta) = f(\underline{x}, \theta) \cdot d\mu_0(\underline{x}) \quad (41)$$

ahol $f(\underline{x}, \theta)$ egy minden \underline{x} -ben 0-tól nagyobb, θ szerint folytonosan deriválható függvény.

$$\int t(\underline{x}) f(\underline{x}, \theta) d\mu_0(\underline{x}) = \theta \quad (42)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \int t(\underline{x}) f(\underline{x}, \theta) d\mu_0(\underline{x}) = 1 \quad (43)$$

$$\int t(\underline{x}) \frac{\partial f(\underline{x}, \theta)}{\partial \theta} d\mu_0(\underline{x}) = 1 \quad (44)$$

Mivel $\mu(\theta)$ minden θ mellett egy 1-re normált mérték:

$$\int f(\underline{x}, \theta) d\mu_0(\underline{x}) = 1 \quad (45)$$

¹⁴sztintén valószínűségi változó

$$\int \frac{\partial f(\underline{x}, \theta)}{\partial \theta} d\mu_0(\underline{x}) = 0 \quad (46)$$

$$\theta \cdot \int \frac{\partial f(\underline{x}, \theta)}{\partial \theta} d\mu_0(\underline{x}) = 0 \quad (47)$$

$$\int \theta \cdot \frac{\partial f(\underline{x}, \theta)}{\partial \theta} d\mu_0(\underline{x}) = 0 \quad (48)$$

A 44. és a 48. egyenleteket egymásból kivonva:

$$\int (t(\underline{x}) - \theta) \frac{\partial f(\underline{x}, \theta)}{\partial \theta} d\mu_0(\underline{x}) = 1 \quad (49)$$

Mivel feltettük hogy minden \underline{x} -ben $f(\underline{x}, \theta) > 0$

$$\int (t(\underline{x}) - \theta) \frac{\partial f(\underline{x}, \theta)}{\partial \theta} \cdot \frac{1}{f(\underline{x}, \theta)} \cdot f(\underline{x}, \theta) d\mu_0(\underline{x}) = 1 \quad (50)$$

$$\int (t(\underline{x}) - \theta) \frac{\partial f(\underline{x}, \theta)}{\partial \theta} \cdot \frac{1}{f(\underline{x}, \theta)} d\mu(\theta)(\underline{x}) = 1 \quad (51)$$

Mivel $\langle f|g \rangle = \int f \cdot g d\mu(x)$ egy skalár szorzat a μ mérték szerint négyzetesen integrálható valós függvények halmazán, érvényes a Cauchy–Bunyakovsky–Schwarz egyenlőtlenség:

$$\int (t(\underline{x}) - \theta)^2 d\mu(\theta)(\underline{x}) \cdot \int \left(\frac{\partial f(\underline{x}, \theta)}{\partial \theta} \cdot \frac{1}{f(\underline{x}, \theta)} \right)^2 d\mu(\theta)(\underline{x}) \geq 1 \quad (52)$$

$$\int (t(\underline{x}) - \theta)^2 d\mu(\theta)(\underline{x}) \geq \frac{1}{\int \left(\frac{\partial f(\underline{x}, \theta)}{\partial \theta} \cdot \frac{1}{f(\underline{x}, \theta)} \right)^2 d\mu(\theta)(\underline{x})} \quad (53)$$

$$F(\theta) = \int \left(\frac{\partial f(\underline{x}, \theta)}{\partial \theta} \cdot \frac{1}{f(\underline{x}, \theta)} \right)^2 d\mu(\theta)(\underline{x}) \quad (54)$$

Vagy ekvivalens módon, más formában:

$$F(\theta) = - \int \frac{\partial^2 \log(f(\underline{x}, \theta))}{\partial \theta^2} d\mu(\theta)(\underline{x}) \quad (55)$$

□

Efficiens vagy hatékony becslésnek nevezzük azt a statisztikát, mely esetében a becslt paraméter szórása éppen az elérhető minimum. A klasszikus valószínűségszámításban ilyen efficiens statisztika az ún. maximum likelihood módszerrel[6] mindig található.

A tétel egy speciális esete, ha Ω véges diszkrét eloszlás. Ekkor a Fisher-információ az alábbi egyszerű módon kapható:

$$F(\theta) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial p_i(\theta)}{\partial \theta} \right)^2 \cdot \frac{1}{p_i(\theta)} \quad (56)$$

$$F(\theta) = - \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial^2 \log(p_i(\theta))}{\partial \theta^2} \right) \cdot p_i(\theta) \quad (57)$$

2.2. Két állapotú rendszer Fisher-információja

Nézzünk egy két állapotú rendszert. Itt Ω két elemű, pl. $\Omega = \{1, 0\}$. $\Pr(1) = p$ és $\Pr(0) = 1 - p$. Legyen a becslendő paraméter p , azaz $\theta = p$. Ezen rendszer Fisher-információja:

$$F = \left(\frac{\partial p}{\partial p} \right)^2 \cdot \frac{1}{p} + \left(\frac{\partial(1-p)}{\partial p} \right)^2 \cdot \frac{1}{1-p}$$

$$F = \frac{1}{p} + \frac{1}{1-p} = \frac{1}{p \cdot (1-p)} \quad (58)$$

Ha n darab független két állapotú rendszerünk van, akkor az egész rendszer Fisher-információja $n \cdot F$ lesz, az efficiens statisztika pedig ebben az esetben az, mikor a p valószínűséget az 1-es állapot relatív gyakoriságával becsüljük.

Ez lehetőséget ad események valószínűségének becslésére azok relatív gyakoriságából. A becslés hibája pedig a végzett mérések számának gyökével fordított arányban csökken:

$$D[\tilde{p}] = \frac{1}{\sqrt{n}} \cdot \sqrt{p(1-p)} \quad (59)$$

Nézzük most a két állapotú rendszer egy másik paraméterezését, mikor $p = \frac{1+\theta}{2}$, $\theta \in (-1, 1)$ ekkor:

$$F(\theta) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{1+\theta} + \frac{1}{1-\theta} \right) = \frac{1}{1-\theta^2} \quad (60)$$

2.3. Fisher-információ és entrópia

Teljesen diszkrét vagy teljesen folytonos eloszlások esetén a Fisher-információ az eloszlás entrópiájával is kapcsolatban van:

Ha diszkrét esetben linearizáljuk az eloszlás paraméter függését θ_0 -pontban:

$$\underline{p}(\theta) \approx \underline{p}(\theta_0) + \underline{a}(\theta_0) \cdot (\theta - \theta_0) \quad (61)$$

ahol

$$\underline{a}(\theta_0) = \left. \frac{\partial \underline{p}(\theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta=\theta_0}, \quad (62)$$

akkor formailag érvényes az alábbi összefüggés:

$$F(\theta_0) = \left. \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} S(\underline{p}(\theta_0) + \underline{a}(\theta_0) \cdot (\theta - \theta_0)) \right|_{\theta=\theta_0}. \quad (63)$$

Folytonos esetben teljesen analóg összefüggés vezethető le.

3. Fisher-információ a kvantummechanikában

A Fisher-információ kvantummechanikai bevezetése két úton is történhet. Egyrészt egy paramétertől függő sűrűségmátrix esetén megkísérhetjük megbecsülni a paramétert, ez a klasszikus valószínűségszámításbeli gondolatmenetet követi. Másrészt sűrűségmátrixokra definiált entrópia segítségével.

Mint láttuk a kvantummechanikában az eloszlást a sűrűségmátrix, az eseményeket pedig projekciók reprezentálják. A klasszikus esetben a paramétertől regulárisan függő eloszlást, a kvantummechanikában a paramétertől független tartójú, paraméter szerint folytonosan differenciálható sűrűségmátrix reprezentálja. Szorítkozzunk a sűrűségmátrix tartójának alterére, itt a sűrűségmátrix (véges dimenziós esetben) minden paraméter érték esetén invertálható.

A kvantummechanikában t statisztikának egy T mátrixszal reprezentált mérhető mennyiség felel meg¹⁵. A statisztika torzítatlansága a kvantumos esetben a következő:

$$\text{Tr } D(\theta)T = \theta \quad (64)$$

Ebben az esetben is levezethetünk egy Cramér-Rao szerű egyenlőtlenséget:

Tétel: Bármely T -vel becsült paraméter szórásnégyzete nagyobb vagy egyenlő, az eloszlás egy Fisher-információhoz hasonló, F_0 mennyiség reciprokánál:

$$D^2[\tilde{\theta}] \geq \frac{1}{F_0(\theta)} \quad (65)$$

¹⁵Tehát T a kvantummechanika axiómái alapján szükség szerint önadjungált

$$F_0(\theta) = \text{Tr} \left(\frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} \right)^2 D^{-1} \quad (66)$$

Def.: A véges dimenziós mátrixok terén is definiálható egy $M_n \times M_n \mapsto \mathbb{C}$ skalár szorzat:

$$\langle\langle A|B \rangle\rangle = \text{Tr} A^* B \quad (67)$$

Ez az ún. Hilbert–Schmidt skalár szorzat, melyre szintén érvényes a Cauchy-Bunyakovszkij-Schwarz egyenlőtlenség:

$$|\langle\langle A|B \rangle\rangle|^2 \leq \langle\langle A|A \rangle\rangle \cdot \langle\langle B|B \rangle\rangle \quad (68)$$

Az egyenlőség pedig akkor és csakis akkor áll fent, ha A és B lineárisan összefüggők.

Szintén skalárszorzat az alábbi kifejezés:

$$\langle\langle A|B \rangle\rangle_D = \text{Tr} D A^* B \quad (69)$$

Ahol D egy teljes rangú, sűrűség mátrix. Ez a skalár szorzat a függvények szorzatainak különböző mértékeken vett integráljával rokon.

Bizonyítás: Mivel a statisztika torzítatlan:

$$\text{Tr} D(\theta) T = \theta \quad (70)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \text{Tr} D(\theta) T = 1 \quad (71)$$

$$\text{Tr} \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} T = 1 \quad (72)$$

Mivel a paraméter minden értéke mellett $D(\theta)$ egy sűrűség mátrix:

$$\text{Tr} D(\theta) = 1 \quad (73)$$

$$\text{Tr} \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} = 0 \quad (74)$$

$$\text{Tr} \theta \cdot \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} = 0 \quad (75)$$

$$\text{Tr} \theta \cdot I \cdot \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} = 0 \quad (76)$$

A 72. és 76. egyenleteket egymásból kionva:

$$\text{Tr} \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} (T - \theta \cdot I) = 1 \quad (77)$$

$$\text{Tr} D D^{-1} \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} (T - \theta \cdot I) = 1 \quad (78)$$

$$\text{Tr} D \left(D^{-1} \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} \right) (T - \theta \cdot I) = 1 \quad (79)$$

Felhasználva a mátrixok skalár szorzatára vonatkozó lemmát, illetve hogy D , $\frac{\partial D}{\partial \theta}$ és T önadjungált:

$$\text{Tr} D \left(D^{-1} \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} \right) \cdot \left(D^{-1} \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} \right)^* \cdot \text{Tr} D (T - \theta \cdot I)^2 \geq 1 \quad (80)$$

$$\text{Tr} D \left(D^{-1} \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} \right) \cdot \left(\frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} D^{-1} \right) \cdot \text{Tr} D (T - \theta \cdot I)^2 \geq 1 \quad (81)$$

$$\text{Tr} \left(\frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} \right)^2 D^{-1} \cdot \text{Tr} D (T - \theta \cdot I)^2 \geq 1 \quad (82)$$

□

Az egyenlőtlenség valóban érvényes minden esetre, viszont az egyenlőség nem minden esetben érhető el:

Az egyenlőség feltétele hogy a sűrűségmátrix és deriváltja minden esetben kommutáljanak.

Mint látható a klasszikus levezetés kvantumelméletbe való átültetése nem tökéletes, így próbáljuk meg a problémát általánosabban megközelíteni:

Újra tételezzünk fel egy torzítatlan T mátrixszal reprezentált statisztikát:

$$\text{Tr} D(\theta) T = \theta \quad (83)$$

$$\text{Tr} \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} T = 1 \quad (84)$$

Az előző levezetés tanulságaiból pedig:

$$\mathrm{Tr} \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} (T - \theta I) = 1 \quad (85)$$

Most vezessünk be a Hilbert–Schmidt skalár szorzat helyett egy általánosabb $\varphi[.,.]$ skalár szorzatot:

$$\varphi[A, B] = \mathrm{Tr} \mathbb{J}_D(A) B \quad (86)$$

Ahol \mathbb{J}_D egy mátrixokon ható lineáris operátor, mely rendelkezik mindazon tulajdonságokkal, melyek által az így definiált kifejezés skalár szorzat lehet.

Tekintsünk az alábbi kifejezésre mint lineáris funkcionálra:

$$X \mapsto \mathrm{Tr} \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} X \quad (87)$$

Mivel ez a mátrixok teréből \mathbb{C} -be (vagy ha csak az önadjungált mátrixok terén értelmezzük akkor \mathbb{R} -be) képező lineáris funkcionál, érvényes rá a Riesz reprezentációs tétel [1], azaz egyértelműen létezik egy olyan mátrix, mellyel való skalár szorzat¹⁶ azonos funkcionálként viselkedik:

$$\exists L \in B(\mathcal{H}) \quad \forall X \in B(\mathcal{H}) \quad \mathrm{Tr} \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} X = \varphi[L, X] \quad (88)$$

Ez, és a 85. egyenlet alapján:

$$\varphi[L, T - \theta I] = 1 \quad (89)$$

Itt ismét alkalmazva a Cauchy-Bunyakovszkij-Schwarz egyenlőtlenséget:

$$\varphi[L, L] \cdot \varphi[T - \theta I, T - \theta I] \geq 1 \quad (90)$$

$$\varphi[T - \theta I, T - \theta I] \geq \frac{1}{\varphi[L, L]} \quad (91)$$

Az egyenlőség pedig megint abban az esetben áll fent, ha T és L lineárisan összefüggnek.

¹⁶az újonnan bevezetett $\varphi[.,.]$ -vel értelmezve

Az így levezetett, általános Cramér-Rao egyenlőtlenség nem egyértelmű, mert $\mathbb{J}_D : B(\mathcal{H}) \mapsto B(\mathcal{H})$ operátort nem rögzítettük. Hogy a kapott egyenlőtlenség valóban a becsült paraméter szórására adjon alsó korlátot, és hogy \mathbb{J}_D valóban skalár szorzatot definiáljon, éljünk a

$$\mathbb{J}_D(X) = \frac{DX + XD}{2} \quad (92)$$

választással. Ebben az esetben:

$$\varphi[T - \theta I, T - \theta I] = \text{Tr}(\mathbb{J}_D(T - \theta I))(T - \theta I) = \text{Tr} D(T - \theta I)^2 \quad (93)$$

Azaz az összefüggés valóban a becsült paraméter szórására vonatkozik.

A végső formula felírásához szükségünk van még L meghatározására. Ezt a 88. és 86. egyenletek alapján tehetjük meg:

$$\forall X \in B(\mathcal{H}) \quad \text{Tr} \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} X = \text{Tr} \mathbb{J}_D(L) X \quad (94)$$

$$\frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} = \mathbb{J}_D(L) \quad (95)$$

$$L = \mathbb{J}_D^{-1} \left(\frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} \right) \quad (96)$$

A fent látható \mathbb{J}_D inverzére az alábbi tétel vonatkozik:

Tétel:

$$\mathbb{J}_D^{-1}(A) = \int_0^\infty e^{-t \cdot \frac{D}{2}} \cdot A \cdot e^{-t \cdot \frac{D}{2}} dt \quad (97)$$

Bizonyítás: Definiáljunk egy mátrixfüggvényt:

$$A(t) = e^{-t \cdot \frac{D}{2}} \cdot A \cdot e^{-t \cdot \frac{D}{2}} \quad (98)$$

Vegyük ennek t szerinti deriváltját. Mivel itt is érvényes a Leibniz-szabály, felírható, hogy:

$$\dot{A}(t) = -\frac{D}{2} e^{-t \cdot \frac{D}{2}} \cdot A \cdot e^{-t \cdot \frac{D}{2}} - e^{-t \cdot \frac{D}{2}} \cdot A \cdot e^{-t \cdot \frac{D}{2}} \frac{D}{2} \quad (99)$$

$$\dot{A}(t) = -e^{-t \cdot \frac{D}{2}} \cdot \left(\frac{DA + AD}{2} \right) \cdot e^{-t \cdot \frac{D}{2}} \quad (100)$$

$$\dot{A}(t) = -e^{-t \cdot \frac{D}{2}} \cdot \mathbb{J}_D(A) \cdot e^{-t \cdot \frac{D}{2}} \quad (101)$$

$$\int_0^\infty e^{-t \cdot \frac{D}{2}} \cdot \mathbb{J}_D(A) \cdot e^{-t \cdot \frac{D}{2}} dt = -[A(t)]_0^\infty \quad (102)$$

Mivel $A(0) = A$ és mivel D invertálható $t \rightarrow \infty$ esetben, $A \rightarrow 0$

$$\int_0^\infty e^{-t \cdot \frac{D}{2}} \cdot \mathbb{J}_D(A) \cdot e^{-t \cdot \frac{D}{2}} dt = A \quad (103)$$

□

Def.: Az így bevezetett mennyiséget symmetric logarithmic derivative (SLD) Fisher-információnak nevezzük [7], [8]:

$$F^C(\theta) = \text{Tr } A(\theta) \mathbb{J}_{D(\theta)}^{-1}(A(\theta)) \quad (104)$$

Ahol $D(\theta)$ és $A(\theta)$ a θ -beli sűrűségmátrix, ill. annak paraméter szerinti deriváltja. $\mathbb{J}_D^{-1}(A)$ pedig:

$$\mathbb{J}_D^{-1}(A) = \int_0^\infty e^{-t \cdot \frac{D}{2}} \cdot A \cdot e^{-t \cdot \frac{D}{2}} dt \quad (105)$$

A kvantummechanikában a mérés fogalma általánosítható arra az esetre is, amikor ennek eredményét nem egy mérhető fizikai mennyiség várható értékével azonosítjuk, hanem a rendszeren olyan pozitív operátorok várható értékeit határozzuk meg, melyek összege az identitás¹⁷. Ez az ún. Pozitív Operator Volume Measure (POVM). Az alábbi tétel a POVM mérések és az SLD Fisher-információt kapcsolja össze:

Tétel: Egy rendszer SLD Fisher-információja a rajta elvégezhető POVM mérések Fisher-információjának szuprémuma.

¹⁷ezekből következik hogy az egyes pozitív operátorokra érvényes hogy: $E_i E_j = \delta_{ij} E_i$

$$F^C(\theta) = \sup \left\{ F(D) \mid \text{POVM mérésekre} \right\} \quad (106)$$

Bizonyítás: Legyen E_i , $i \in I$ egy POVM mérés, azaz

$$\forall i \quad E_i \geq 0 \quad \text{és} \quad \sum_i E_i = I \quad (107)$$

Először azt bizonyítjuk, hogy a POVM mérés klasszikus Fisher-információja minden esetben kisebb az SLD Fisher-információnál. Ez az alábbi egyenlőtlenséget jelenti (ahol A a sűrűségmátrix paraméter szerinti deriváltja):

$$\sum_i \frac{(\text{Tr } AE_i)^2}{\text{Tr } DE_i} \leq \text{Tr } A \mathbb{J}_D^{-1}(A) \quad (108)$$

Definiáljuk az alábbi segéd mennyiséget:

$$B = \mathbb{J}_D^{-1}(A) \Rightarrow A = \mathbb{J}_D(B) = \frac{BD + DB}{2} \quad (109)$$

Felyezzük ki az egyenlőtlenséget a bevezetett B segítségével:

$$\sum_i \frac{(\text{Tr } \frac{BD+DB}{2} E_i)^2}{\text{Tr } DE_i} \leq \text{Tr } \frac{BD + DB}{2} B \quad (110)$$

Az egyenletet átrendezve, és kihasználva hogy megengedett a Tr alatti ciklikus permutáció:

$$\sum_i \frac{(\text{Tr } \frac{BD+DB}{2} E_i)^2}{\text{Tr } DE_i} \leq \text{Tr } DB^2 \quad (111)$$

$$\sum_i \frac{(\text{Tr } BDE_i + DBE_i)^2}{4\text{Tr } DE_i} \leq \text{Tr } DB^2 \quad (112)$$

A bal oldali négyzetre emelés kifejtve:

$$\sum_i \frac{(\text{Tr } BDE_i)^2 + 2(\text{Tr } BDE_i)(\text{Tr } DBE_i) + (\text{Tr } DBE_i)^2}{4 \cdot \text{Tr } DE_i} \leq \text{Tr } DB^2 \quad (113)$$

A bal oldali első tagra felírható:

$$(\text{Tr } BDE_i)^2 = \left(\text{Tr } E_i^{1/2} B D^{1/2} \cdot D^{1/2} E_i^{1/2} \right)^2 \quad (114)$$

Erre alkalmazva a Cauchy-Bunyakovszkij-Schwarz egyenlőtlenséget:

$$(\text{Tr } BDE_i)^2 \leq \left(\text{Tr } E_i^{1/2} B D^{1/2} \cdot D^{1/2} B E_i^{1/2} \right) \cdot \left(\text{Tr } E_i^{1/2} D^{1/2} \cdot D^{1/2} E_i^{1/2} \right) \quad (115)$$

Majd a jobb oldal rendezve:

$$(\text{Tr } BDE_i)^2 \leq (\text{Tr } BDBE_i) \cdot (\text{Tr } DE_i) \quad (116)$$

Hasonló gondolatmenettel megkapható, hogy a négyzetes kifejezésben szereplő „másik fajta” tag is felülről becsülhető:

$$(\text{Tr } DBE_i)^2 \leq (\text{Tr } BDBE_i) \cdot (\text{Tr } DE_i) \quad (117)$$

Így a szumma:

$$\sum_i \frac{(\text{Tr } BDE_i)^2 + 2 \cdot (\text{Tr } BDE_i) \cdot (\text{Tr } DBE_i) + (\text{Tr } DBE_i)^2}{4 \cdot \text{Tr } DE_i} \leq \quad (118)$$

$$\leq \sum_i \frac{(\text{Tr } BDBE_i) \cdot (\text{Tr } DE_i)}{\text{Tr } DE_i} \quad (119)$$

Így az eredeti bal oldalra kapott egyenlőtlenség:

$$\sum_i \frac{(\text{Tr } AE_i)^2}{\text{Tr } DE_i} \leq \sum_i (\text{Tr } BDBE_i) = \text{Tr } BDB \sum_i E_i \quad (120)$$

Kihasználva hogy E_i -k összege az identitás, és elvégezve a Tr alatti ciklikus permutációt:

$$\sum_i \frac{(\text{Tr } AE_i)^2}{\text{Tr } DE_i} \leq \text{Tr } DB^2 \quad (121)$$

Most pedig azt kell belátnunk, hogy az egyenlőség elérhető:

Állítás: Az egyenlőség akkor érhető el, ha B -vel felcserélhető projekciókkal mérünk:

$$B = \sum_k \lambda_k E_k$$

Ekkor:

$$\sum_i \frac{(\text{Tr } AE_i)^2}{\text{Tr } DE_i} = \sum_i \frac{(\text{Tr } \frac{BD+DB}{2} E_i)^2}{\text{Tr } DE_i} \quad (122)$$

$$\sum_i \frac{(\text{Tr } AE_i)^2}{\text{Tr } DE_i} = \sum_i \frac{\left(\frac{\text{Tr } BDE_i + \text{Tr } DBE_i}{2} \right)^2}{\text{Tr } DE_i} \quad (123)$$

A jobb oldali négyzet alatti kifejezést kifejtve:

$$\frac{\text{Tr } BDE_i + \text{Tr } DBE_i}{2} = \frac{\text{Tr } (\sum_k \lambda_k E_k) DE_i + \text{Tr } D (\sum_k \lambda_k E_k) E_i}{2} \quad (124)$$

Kihasználva hogy $E_i E_j = \delta_{ij} E_i$:

$$\frac{\text{Tr } BDE_i + \text{Tr } DBE_i}{2} = \text{Tr } D\lambda_i E_i \quad (125)$$

$$\sum_i \frac{(\text{Tr } AE_i)^2}{\text{Tr } DE_i} = \sum_i \frac{(\text{Tr } D\lambda_i E_i)^2}{\text{Tr } DE_i} = \sum_i \frac{(\lambda_i \text{Tr } DE_i)^2}{\text{Tr } DE_i} = \sum_i \text{Tr } D\lambda_i^2 E_i \quad (126)$$

$$\sum_i \frac{(\text{Tr } AE_i)^2}{\text{Tr } DE_i} = \text{Tr } DB^2 \quad (127)$$

□

Nagy különbség a klasszikus esethez képest, hogy nem kommutatív esetben az efficiens mérés függ a paraméter (valódi) értékétől, azaz különböző paraméter értékek mellett más-más méréssel érhetjük el a levezetett minimális szórást.

3.1. Fisher-információ bevezetése

Neumann-entrópia alapján

Mivel a klasszikus valószínűségi számításban a Fisher-információ megkapható az eloszlás entrópia változásából, definiáljunk a kvantummechanikában is egy analóg fogalmat:

Linearizáljuk a $D(\theta)$ sűrűség mátrixot θ_0 pontban:

$$D(\theta) \approx D(\theta_0) + A(\theta_0) \cdot (\theta - \theta_0), \quad (128)$$

ahol

$$A(\theta_0) = \left. \frac{\partial D(\theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta=\theta_0} \quad (129)$$

Most pedig klasszikus valószínűségi számításbeli analógia alapján vezessük be az ún Kubo-Mori-féle Fisher-információt:

Def.:

$$F^K(\theta_0) = \left. \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} S(D(\theta_0) + A(\theta_0) \cdot (\theta - \theta_0)) \right|_{\theta=\theta_0} \quad (130)$$

Hogy a kifejezést egyszerűbb alakra hozzassuk szükségünk van az alábbi mátrix-analízis beli tételkre:

Tétel:

$$\frac{\partial}{\partial x} \text{Tr } f(A + B \cdot x) \Big|_{x=0} = \text{Tr } B \cdot f'(A) \quad (131)$$

A tétel polinomokra könnyen belátható, majd az approximációs tétel alapján általánosítható.

Tétel:

$$\frac{\partial}{\partial x} \log(A + B \cdot x) = \int_0^\infty (t \cdot I + A + B \cdot x)^{-1} B (t \cdot I + A + B \cdot x)^{-1} dt \quad (132)$$

Az előző két tétel bizonyítása megtalálható pl. [2]-ben.

A kifejezés egyszerűsítése érdekében az általánosság elvesztése nélkül feltehetjük, hogy $\theta_0 = 0$. Majd vezessük be az alábbi függvényt:

$$\eta(x) = x \cdot \log(x) \Rightarrow \eta'(x) = 1 + \log(x) \quad (133)$$

Ekkor a Kubo-Mori féle Fisher-információ:

$$F^K = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \text{Tr } \eta(D + A \cdot \theta) \Big|_{\theta=0} \quad (134)$$

Kihasználva a 131. beli formulát

$$F^K = \frac{\partial}{\partial \theta} \text{Tr } A \cdot \eta'(D + A \cdot \theta) \Big|_{\theta=0} \quad (135)$$

$$F^K = \frac{\partial}{\partial \theta} \text{Tr } A \cdot \log(D + A \cdot \theta) \Big|_{\theta=0} \quad (136)$$

Kihasználva 132. beli képletet:

$$F^K = \text{Tr } A \cdot \int_0^\infty (t \cdot I + D + A \cdot \theta)^{-1} A (t \cdot I + D + A \cdot \theta)^{-1} dt \Big|_{\theta=0} \quad (137)$$

$$F^K = \text{Tr } A \cdot \int_0^\infty (t \cdot I + D)^{-1} A (t \cdot I + D)^{-1} dt \quad (138)$$

Bevezetve a $\mathbb{K}_D^{-1} : B(\mathcal{H}) \mapsto B(\mathcal{H})$ lineáris operátort:

$$\mathbb{K}_D^{-1}(A) = \int_0^\infty (t \cdot I + D)^{-1} A (t \cdot I + D)^{-1} dt \quad (139)$$

Így a Kubo-Mori-féle Fisher-információ az előzőleg definiált SLD Fisher-információhoz alakilag hasonlóan is definiálható:

$$F^K(\theta) = \text{Tr } A(\theta) \mathbb{K}_{D(\theta)}^{-1}(A(\theta)) \quad (140)$$

Ahol $D(\theta)$ és $A(\theta)$ a θ -beli sűrűségmátrix, ill. annak paraméter szerinti deriváltja. $\mathbb{K}_D^{-1}(A)$ pedig:

$$\mathbb{K}_D^{-1}(A) = \int_0^\infty (t \cdot I + D)^{-1} A (t \cdot I + D)^{-1} dt \quad (141)$$

4. 1/2 spinű részecske állapotának becslése

Egy 1/2 spinű részecske, egy két állapotú kvantum rendszer. Ehhez az ún. *qubit*hez tartozó Hilbert-tér két dimenziós: $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$. Így egy qubit kevert állapotait a 2×2 -s komplex sűrűségmátrixok reprezentálják. Minden ilyen 2×2 -es sűrűségmátrix egyértelműen előállítható az alábbi módon:

$$D = \frac{1}{2} \cdot (I + x_1 \sigma_1 + x_2 \sigma_2 + x_3 \sigma_3) \quad \text{ha} \quad x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq 1 \quad (142)$$

Ahol σ_i az i . Pauli mátrix:

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (143)$$

Legyen:

$$r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} \quad (144)$$

$$X = \frac{x_1 \sigma_1 + x_2 \sigma_2 + x_3 \sigma_3}{r} \quad (145)$$

$$D = \frac{1}{2} \cdot (I + rX) \quad (146)$$

Annak érdekében, hogy kiszámolhassuk egy általános esetben a két féle Fisher információt képesnek kell lennünk egy ilyen típusú mátrixra kiszámolni a szükséges függvények értéket:

Ehhez az alábbi megállapításokat tehetjük: Egyszerű számolással belátható, hogy:

$$X^2 = I, \quad (147)$$

ezáltal:

$$X^{2k} = I \quad X^{2k+1} = X \quad k \in \mathbb{Z} \quad (148)$$

Tétel:

$$e^{sX} = ch(s)I + sh(s)X \quad (149)$$

Bizonyítás: Értelmezzük az exponenciális függvényt a Taylor-sorával:

$$e^A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k \quad (150)$$

Alkalmazzuk ezt $A = sX$ mátrixra:

$$e^{sX} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} s^k X^k \quad (151)$$

Ami 148. képletek alapján:

$$e^{sX} = \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} s^{2k} \right) I + \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} s^{2k+1} \right) X \quad (152)$$

A kiemelt végtelen sorok éppen $ch(s)$ ill. $sh(s)$ sorai.

$$e^{sX} = ch(s)I + sh(s)X \quad (153)$$

□

Annak érdekében, hogy értelmezhezzük a 97. képletben használt kifejezéseket, szükségünk van még az alábbi tételre:

Tétel: Ha A és B mátrixok felcserélhetőek, akkor:

$$e^{A+B} = e^A e^B \quad (154)$$

Bizonyítás: Fejezzük ki e^A és e^B függvényeket sorokkal, majd szorozzuk össze a két végtelen sort:

$$e^A e^B = \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k \right) \cdot \left(\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{\ell!} B^\ell \right) \quad (155)$$

$$e^A e^B = \sum_{k,\ell} \frac{1}{k!\ell!} A^k B^\ell \quad (156)$$

$$e^A e^B = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} C_n \quad (157)$$

Ahol C_n az alábbi módon írható:

$$C_n = n! \cdot \left(\sum_{m=0}^n \frac{1}{m!(n-m)!} A^m B^{n-m} \right) \quad (158)$$

Mivel A és B felcserélhetőek alkalmazható a binomiális tétel:

$$C_n = (A + B)^n \quad (159)$$

Tehát:

$$e^A e^B = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (A + B)^n = e^{A+B} \quad (160)$$

□

Most fejezzük ki a 97. képletben használt $e^{-t\frac{D}{2}}$ kifejezést:

$$e^{-t\frac{D}{2}} = e^{-\frac{t}{4} \cdot I - \frac{tr}{4} \cdot X} \quad (161)$$

$$e^{-t\frac{D}{2}} = e^{-\frac{t}{4} I} \cdot \left(ch \left(-\frac{rt}{4} \right) I + sh \left(-\frac{rt}{4} \right) X \right) \quad (162)$$

$$e^{-t\frac{D}{2}} = e^{-\frac{t}{4}} \cdot \left(ch\left(\frac{rt}{4}\right) I - sh\left(\frac{rt}{4}\right) X \right) \quad (163)$$

Most számoljuk ki a 97. képlettel adott $J_D^{-1}(A)$ mennyiséget:

$$\mathbb{J}_D^{-1}(A) = \int_0^\infty e^{-t\frac{D}{2}} \cdot A \cdot e^{-t\frac{D}{2}} dt \quad (164)$$

$$\mathbb{J}_D^{-1}(A) = \int_0^\infty e^{-\frac{t}{4}} \left(ch\left(\frac{rt}{4}\right) I - sh\left(\frac{rt}{4}\right) X \right) \cdot A \cdot e^{-\frac{t}{4}} \left(ch\left(\frac{rt}{4}\right) I - sh\left(\frac{rt}{4}\right) X \right) dt$$

A kifejezés átrendezve:

$$\begin{aligned} \mathbb{J}_D^{-1} &= \int_0^\infty e^{-\frac{t}{2}} \left(A \cdot ch^2\left(\frac{rt}{4}\right) + XAX sh^2\left(\frac{rt}{4}\right) - \right. \\ &\quad \left. sh\left(\frac{rt}{4}\right) ch\left(\frac{rt}{4}\right) (XA + AX) \right) dt \\ &= \int_0^\infty e^{-\frac{t}{2}} \left(A \cdot ch^2\left(\frac{rt}{4}\right) + XAX \cdot sh^2\left(\frac{rt}{4}\right) - \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{2} sh\left(\frac{rt}{2}\right) (XA + AX) \right) dt \\ &= \left(\int_0^\infty e^{-\frac{t}{2}} ch^2\left(\frac{rt}{4}\right) dt \right) \cdot A + \left(\int_0^\infty e^{-\frac{t}{2}} sh^2\left(\frac{rt}{4}\right) dt \right) \cdot XAX - \\ &\quad \frac{1}{2} \left(\left(\int_0^\infty e^{-\frac{t}{2}} sh\left(\frac{rt}{2}\right) dt \right) \cdot (AX + XA) \right) \end{aligned}$$

A mátrixok előtt álló integrálok kiszámolhatók:

$$\int_0^\infty e^{-\frac{t}{2}} ch^2\left(\frac{rt}{4}\right) dt = \frac{1}{1-r^2} + 1 \quad (165)$$

$$\int_0^\infty e^{-\frac{t}{2}} sh^2\left(\frac{rt}{4}\right) dt = \frac{1}{1-r^2} - 1 \quad (166)$$

$$\frac{1}{2} \left(\int_0^\infty e^{-\frac{t}{2}} sh\left(\frac{rt}{2}\right) dt \right) = \frac{r}{1-r^2} \quad (167)$$

Így:

$$\mathbb{J}_D^{-1}(A) = \left(\frac{1}{1-r^2} + 1 \right) \cdot A + \left(\frac{1}{1-r^2} - 1 \right) \cdot XAX - \frac{r}{1-r^2} \cdot (AX + XA) \quad (168)$$

Most fejezzük ki az SLD Fisher-információt:

$$F^C = \text{Tr } A \cdot \mathbb{J}_D^{-1}(A) \quad (169)$$

$$F^C = \text{Tr } A \cdot \left(\left(\frac{1}{1-r^2} + 1 \right) \cdot A + \left(\frac{1}{1-r^2} - 1 \right) \cdot XAX - \frac{r}{1-r^2} \cdot (AX + XA) \right) \quad (170)$$

Tekintsük azokat a helyzeteket, mikor $A = n_1\sigma_1 + n_2\sigma_2 + n_3\sigma_3$ és $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1$, ekkor $A \cdot A = I$

$$F^C = \text{Tr} \left(\left(\frac{1}{1-r^2} + 1 \right) I + \left(\frac{1}{1-r^2} - 1 \right) \cdot AXAX - \frac{r}{1-r^2} \cdot (X + AXA) \right) \quad (171)$$

Mivel $\text{Tr } X = 0$, $\text{Tr } I = 2$ és a Tr alatt megangedett a ciklikus permutáció:

$$F^C = 2 \cdot \left(\frac{1}{1-r^2} + 1 \right) + \left(\frac{1}{1-r^2} - 1 \right) \cdot \text{Tr} (AX)^2 \quad (172)$$

A kapott formulából látszik, hogy ha $A = X$ akkor a kvantumrendszer egy klasszikus bitként viselkedik, így Fisher-információja is megegyezik a 60. egyenletben kapott klasszikus Fisher-információval.

Ha $r = 0$ azaz mikor qubit maximálisan kevert állapotban van, akkor A -tól függetlenül a Fisher-információ 4, ami a klasszikus esetben egy $1/2$ valószínűséggel 0, $1/2$ valószínűséggel 1 állapotban lévő bit klasszikus Fisher-információjának felel meg.

Paraméterezzük a szituációt az alábbi módon:

$$X = \sigma_3 \quad (173)$$

$$A = \sin(\vartheta)\cos(\varphi)\sigma_1 + \sin(\vartheta)\sin(\varphi)\sigma_2 + \cos(\vartheta)\sigma_3 \quad (174)$$

Ekkor:

$$AX = -i \cdot \sin(\vartheta)\cos(\varphi)\sigma_2 + i \cdot \sin(\vartheta)\sin(\varphi)\sigma_1 + \cos(\vartheta)I \quad (175)$$

Mivel a „vegyes tagok”, és Tr -e 0, $\text{Tr } I = 2$:

$$\text{Tr} (AX)^2 = -\sin^2(\vartheta) \cdot 2 + \cos^2(\vartheta) \cdot 2 \quad (176)$$

$$\text{Tr} (AX)^2 = 4 \cdot \cos^2(\vartheta) - 2 \quad (177)$$

Így F^C megkapható r és ϑ függvényében 172. és 177. egyenletekből, és egy kis átrendezés után:

$$F^C(r, \vartheta) = 4 \cdot \left(\left(\frac{1}{1-r^2} - 1 \right) \cdot \cos^2(\vartheta) + 1 \right) \quad (178)$$

Határozzuk meg az efficiens mérést reprezentáló T_e mátrixot. Mivel a rendszer forgásszimmetrikus z tengely¹⁸ körül, A -nak és T_e -nek csak x és z irányú vetületével foglalkozunk:

$$A = \sin(\vartheta)\sigma_1 + \cos(\vartheta)\sigma_3 \quad (179)$$

$$T_e = \sin(\vartheta_e)\sigma_1 + \cos(\vartheta_e)\sigma_3 \quad (180)$$

Hogy T_e és $B = \mathbb{J}_D^{-1}(A)$ felcserélhetőek lehessenek, éljünk a

$$T_e = \frac{B}{||B||} \quad (181)$$

választással, mely biztosítja azt is, hogy T_e egy tényleges spinmérés legyen.

Mivel σ_1 és σ_3 egymásra ortogonálisak a Hilbert-Schmidt skalár szorzatban, normájuk pedig 2:

$$B = \frac{1}{2} (\text{Tr } \sigma_1 B) \sigma_1 + \frac{1}{2} (\text{Tr } \sigma_3 B) \sigma_3 \quad (182)$$

Így $\tan(\vartheta_e)$ kifejezhető:

$$\tan(\vartheta_e) = \frac{\text{Tr } \sigma_1 \cdot B}{\text{Tr } \sigma_3 \cdot B} \quad (183)$$

Mivel

$$\text{Tr } \sigma_3 \cdot \mathbb{J}_D^{-1}(A) = \frac{4}{1-r^2} \cdot \cos(\vartheta) \quad (184)$$

$$\text{Tr } \sigma_1 \cdot \mathbb{J}_D^{-1}(A) = 4 \cdot \sin(\vartheta) \quad (185)$$

$$\tan(\vartheta_e) = (1-r^2) \cdot \tan(\vartheta) \quad (186)$$

¹⁸a 3-as irány

4.1. Kubo-Mori-féle Fisher-információ

Ez esetben a legfontosabb számolandó mennyiség:

$$\mathbb{K}_D^{-1}(A) = \int_0^\infty (D + I \cdot t)^{-1} A (D + I \cdot t)^{-1} dt \quad (187)$$

Először értelmezzük a formulában szereplő $(D + I \cdot t)^{-1}$ kifejezést. Újra áttérve a sűrűség mátrix 146. képlet szerinti felírására:

$$(D + I \cdot t)^{-1} = \left(\frac{1}{2}I + \frac{1}{2}rX + tI \right)^{-1} = \left(\left(\frac{1}{2} + t \right) I + \frac{1}{2}rX \right)^{-1} \quad (188)$$

Átalakítás után:

$$(D + I \cdot t)^{-1} = \frac{2}{1 + 2t} \left(I - \frac{-r}{1 + 2t} X \right)^{-1} \quad (189)$$

Mivel $\frac{-r}{1+2t}$ abszolút értéke minden $r < 1$ és $t > 0$ esetben egynél kisebb, (X normája pedig 1) az inverz kifejtethető egy Neumann-sorral:

$$(D + I \cdot t)^{-1} = \frac{2}{1 + 2t} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{-r}{1 + 2t} \right)^k X^k \quad (190)$$

Ismét felhasználva a 148. képletbeli összefüggéseket:

$$(D + I \cdot t)^{-1} = \frac{2}{1 + 2t} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{-r}{1 + 2t} \right)^{2k} I + \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{-r}{1 + 2t} \right)^{2k+1} X \right) \quad (191)$$

A végtelen mértani sorokat kifejtve és rendezve:

$$(D + I \cdot t)^{-1} = 2 \left(\frac{1 + 2t}{(1 + 2t)^2 - r^2} I - \frac{r}{(1 + 2t)^2 - r^2} X \right) \quad (192)$$

Most számoljuk ki a Kubo-Mori féle Fisher-információt:

$$F^K = \text{Tr } A \mathbb{J}_D^{-1}(A) = \text{Tr } A \int_0^\infty (D + I \cdot t)^{-1} A (D + I \cdot t)^{-1} dt \quad (193)$$

Éljünk a $1 + 2t = s$ helyettesítéssel:

$$F^K = \text{Tr } A \int_1^\infty 2 \left(\frac{s}{s^2 - r^2} I - \frac{r}{s^2 - r^2} X \right) A \cdot 2 \left(\frac{s}{s^2 - r^2} I - \frac{r}{s^2 - r^2} X \right) \frac{ds}{2} \quad (194)$$

$$F^K = 2 \cdot \left(\text{Tr } \left(\int_1^\infty \frac{s^2}{(s^2 - r^2)^2} ds \right) I + \text{Tr } \left(\int_1^\infty \frac{r^2}{(s^2 - r^2)^2} ds \right) A X A X \right) \quad (195)$$

A kifejezésben szereplő integrálok kifejezhetők:

$$\int_1^\infty \frac{s^2}{(s^2 - r^2)^2} ds = \frac{1}{4} \left(\frac{2}{1 - r^2} + \frac{1}{r} \cdot \log \left(\frac{1 + r}{1 - r} \right) \right) \quad (196)$$

$$\int_1^\infty \frac{r^2}{(s^2 - r^2)^2} ds = \frac{1}{4} \left(\frac{2}{1 - r^2} - \frac{1}{r} \cdot \log \left(\frac{1 + r}{1 - r} \right) \right) \quad (197)$$

Mivel $\text{Tr } I = 2$

$$F^K = \left(\frac{2}{1 - r^2} + \frac{1}{r} \cdot \log \left(\frac{1 + r}{1 - r} \right) \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{2}{1 - r^2} - \frac{1}{r} \cdot \log \left(\frac{1 + r}{1 - r} \right) \right) \text{Tr } (AX)^2 \quad (198)$$

Látszik hogy kommutáló esetben, mikor A és X felcserélhetőek, megint visszkapjuk a klasszikus esetet, és mivel:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{r} \cdot \log \left(\frac{1 + r}{1 - r} \right) = 2 \quad (199)$$

maximálisan kevert állapotban, azaz mikor $r = 0$ ez a fajta Fisher-információ is A -tól függetlenül 4.

Megint paraméterezzük a szituációt a 173. és 174. egyenleteknek megfelelően. A már kiszámolt 177. egyenlet alapján:

$$F^K = \left(\frac{4}{1 - r^2} - \frac{2}{r} \cdot \log \left(\frac{1 + r}{1 - r} \right) \right) \cdot \cos^2(\vartheta) + \frac{2}{r} \cdot \log \left(\frac{1 + r}{1 - r} \right) \quad (200)$$

Mivel

$$\frac{2}{r} \cdot \log \left(\frac{1 + r}{1 - r} \right) \geq 4 \quad (201)$$

minden $r \in (0, 1)$ esetén, ezért a Kubo-Mori Fisher-információ minden helyzetben nagyobb értéket ad az SLD Fisher-információnál:

$$F^K(r, \vartheta) \geq F^C(r, \vartheta) \quad (202)$$

5. További kutatási lehetőségek

Kvantumrendszerek állapotának mérése igen nagy jelentőségű azokban a helyzetekben, mikor kvantumosan közvetítünk vagy tárolunk információt. Előfordulhatnak olyan

esetek, mikor részleges információnk van az adott rendszer állapotáról, egy vagy több paraméter viszont számunkra ismeretlen. Ekkor fontos probléma az effektív mérési eljárás megtalálása, és annak szórásának becslése. A paraméter becslés kiterjeszthető több paraméter esetére is [2], [3], illetve [4].

Mivel kvantumrendszerek mérhetősége egyes esetekben jelentősen eltérhet klasszikus rendszerek mérhetőségétől, érdekes lehet a kettő közti átmenet, vagyis a sok rendszerből álló kvantumrendszerek határesetek.

Jelentőséggel bírhat ezen túl összetett kvantumrendszerek optimális mérési módszereinek meghatározása, melyekkel a legkisebb szórással tudjuk a rendszer állapotát megbecsülni.

Hivatkozások

- [1] Petz Dénes, *Lineáris Analízis*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2002.
- [2] Petz Dénes, *Mátrix Analízis*, preprint (2009).
- [3] D. Petz, *Quantum information theory and quantum statistics*, Springer, Berlin, Heidelberg, 2008.
- [4] D. Petz, Covariance and Fisher information in quantum mechanics, J Phys. A: Math. Gen. **35**(2003), 79-91.
- [5] Neumann János, *A Kvantummechanika matematikai alapjai*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1980.
- [6] Szatmáry Zoltán, *Mérések kiértékelése egyetemi jegyzet*,
http://www.reak.bme.hu/fileadmin/user_upload/felhasznalok/szatmary/merkiert.pdf.
- [7] S. L. Braunstein and C. M. Caves, Statistical distance and the geometry of quantum states, Phys. Rev. Lett. **72**(1994), 3439-3443.
- [8] M. Hayashi, Two quantum analogues of Fisher information from a large deviation viewpoint of quantum estimation, J. of Physics A: Mathematical and General, **35**(2002), 7689-7727.
- [9] O. Johnson. *Information theory and the central limit theorem*, Imperial College Press, 2004.