

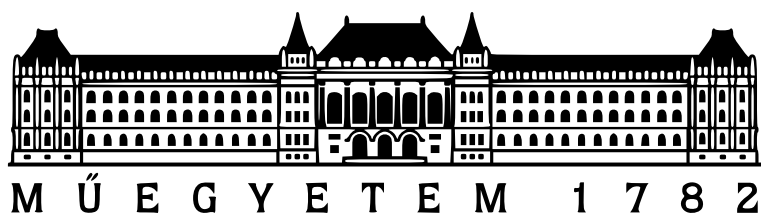
Tudományos Diákköri Konferencia 2022

A kvantummechanikai állapottér egy
felbontása által indukált geometria

Szondi Máté Álmos

Negyedéves építészmérnök hallgató

Témavezető: Dr. Andai Attila
egyetemi docens
BME Analízis Tanszék



BME
2022

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	1
2. Kvantum-információgeometriai alapfogalmak	2
2.1. Differenciálgeometriai alapfogalmak	2
2.2. Kvantummechanikai alapfogalmak	4
2.3. Mátrixfüggvények deriválása	8
2.4. Az állapottér felbontása	9
3. Új eredmények	13
3.1. Monoton metrikák unitér invarianciája	13
3.2. A φ függvény deriválása	14
3.3. A felbontásban szereplő komponenseken indukált metrika	18
4. Konklúzió	22
Köszönetnyilvánítás	23
Hivatkozások	24

Előszó

A kvantumszámítógép és ebből adódóan a kvantummechanika szóval is, hosszú évek óta találkozhat az ember, akár a bulvársajtóban felröppenő egy-egy (ál)hír kapcsán, akár ismeretterjesztő irodalomban vagy egyéb médiában. Néhol szenzációhajhászból máshol ismeretterjesztő céllal kerül szóba a kvantummechanika egyik *misztikus* tulajdonsága, az összefonódott állapotok fogalma és általában ugyanitt hosszasan részletezik, hogy ezen állapotok létezése nyithat új utat a számítástechnikában. Ezek után természetesen merül fel a kérdés, hogy vajon a kvantumállapotok hány százaléka összefonódott.

Szakmai körökben először Życzkowski vetette fel ezt a kérdést 1998-ban az alábbi formában [4]. „Is the world more classical or more quantum? Does it contain more quantum correlated (entangled) states than classically correlated ones?” Meglepő módon erre az egyszerű kérdésre még a legegyszerűbb összetett kvantummechanikai rendszer (qubit-qubit rendszer) esetén sem ismert a válasz, pusztán numerikus szimulációk állnak rendelkezésre [2, 3, 8, 9]. 2017-ben sikerült Andai, Lovas szerzőpárosnak analitikus eszközökkel igazolni, hogy valós 2 dimenziós Hilbert-téren modellezhető kvantummechanikai rendszerek (rebit) esetén a rebit-rebit állapotok összefonódottságának a valószínűsége $\frac{35}{64}$ (mely összhangban van a numerikus szimulációkkal) és integrálformulát adtak a qubit-qubit rendszer összefonódottsági valószínűségének a kiszámítására [5]. A jelen dolgozat ebbe a kutatási irányba csatlakozik be.

Amikor események valószínűséget kell meghatározni kulcsfontosságú, hogy milyen mértékkel látjuk el az események terét. A kvantummechanikai állapotok terén fizikai relevanciával bíró valószínűségi mértéket úgy kaphatunk, hogy monoton Riemann-metrikák (általánosított Fisher-információ) által generált térfogati formával számolunk. A fent említett 2017-es publikációban szerepel az összetett rendszernek egy olyan felbontása, melyben jól jellemezhető az összefonódottság, azonban a mérsékelt fizikai relevanciával bíró Hilbert–Schmidt-féle skalárszorzásból származó térfogati formával tekinti az állapotteret.

A jelen dolgozatban az állapotteret tetszőleges monoton metrikával tekintjük és megvizsgáljuk, hogy a fenti cikkben szereplő felbontás milyen metrikát indukál az egyes komponenseken. Ez egy elengedhetetlen lépés ahhoz, hogy az összefonódottsági valószínűséget fizikai relevanciával bíró térfogati mértékek szerint meg lehessen határozni.

1. Bevezetés

A statisztikában kulcsfontosságú Fisher-információ általánosítása a nemkommutatív esetre (egészen pontosan a kvantummechanikai állapottérre) Petz Dénes egyik kimagasló eredménye [6, 7], mely alapkőve a nemkommutatív információgeometriának. A klasszikus esettel ellentétben, a nemkommutatív esetben nem egyértelmű a Fisher-információ, hanem azok bizonyos operátormonoton függvényekkel indexelhetők. Ezek a Fisher-információk Riemann-metrikának tekinthetők az állapottéren, ami magyarázza a monoton metrika elnevezésüket. Ezek a monoton metrikák a kvantuminformáció elmélet számtalan ágában kapnak kiemelkedő szerepet (pl. paraméterbecslésben, határozatlansági relációkban, Bayes-statisztikában, állapottér és kvantumcsatornák geometriájának vizsgálatánál, állapotok összefonódottsági mértékének meghatározásában stb.).

A qubit-qubit rendszerben az állapotok szeparálhatóságának, illetve összefonódottságának a vizsgálatánál Lovas Attila és Andai Attila megmutatták [5], hogy a $2n$ dimenziós Hilbert-tér feletti $\mathcal{M}_{2n}^{+,1}$ állapotteret lehet és érdemes is felbontani a $\mathcal{M}_{2n}^{+,1} \simeq \mathcal{M}_n \times \mathcal{E}_n \times \mathcal{B}_1(n)$ módon, ahol $\mathcal{M}_n$ az n dimenziós Hilbert-térhez tartozó állapottér, $\mathcal{E}_n$ az $n \times n$ -es mátrixok terében az $] -I, I[$ intervallum, valamint $\mathcal{B}_1(n)$ azon $n \times n$ -es mátrixok tere, melyek operátornormája egynél kisebb.

A dolgozatban meghatározom, hogy a fenti felbontásban szereplő komponenseken milyen metrikát indukálnak az $\mathcal{M}_{2n}^{+,1}$ téren értelmezett monoton metrikák, mely segít megérteni két $\mathcal{M}_n$ térbeli részecskéből álló összetett rendszer állapotterének a geometriáját. Továbbá ennek segítségével lehetőség nyílik az összefonódottsági valószínűség meghatározására fizikailag releváns mértékek szerint.

2. Kvantum-információgeometriai alapfogalmak

A következő alfejezetben a dolgozat megértéséhez szükséges alapvető fogalmakat definiáljuk, valamint a későbbi állítások bizonyításához és értelmezéséhez szükséges tételket, lemmákat mondjuk ki. A dolgozatban az idevágó szakirodalomban elterjedt jelöléseket igyekszünk használni.

2.1. Differenciálgeometriai alapfogalmak

2.1. Definíció. Legyen $\mathcal{M}$ topologikus tér, $U \subset M$ nyílt halmaz és $x : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ olyan leképezés, mely homeomorfizmus U és a $\text{Ran}(x)$ nyílt halmaz között. Ekkor minden $p \in U$ pontra az (U, x) lokális térkép, vagy lokális koordináta-rendszer az M halmazon a p körül.

2.2. Definíció. Az $\mathcal{M}$ topologikus tér térképeinek egy A családja atlasz, ha a családhoz tartozó térképek értelmezési tartományainak az uniója $\mathcal{M}$.

2.3. Definíció. Az $(\mathcal{M}, A)$ pár n dimenziós topologikus sokaság, ha $\mathcal{M}$ megszámlálható bázisú Hausdorff-féle topologikus tér és az A olyan atlasz, melynek minden $x \in A$ elemére $\text{Ran}(x) \subseteq \mathbb{R}^n$ teljesül.

2.4. Definíció. Az $(\mathcal{M}, A)$ párt n dimenziós sima sokaságnak hívjuk, ha:

1. $(\mathcal{M}, A)$ n dimenziós topologikus sokaság,
2. $A = (\varphi)_{i \in I}$ térképek rendszere, hogy $\forall i, j$ indexre a $\varphi_i \circ \varphi_j^{-1} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ leképezés végtelenszer differenciálható.

2.5. Definíció. Legyen $(\mathcal{M}, A)$ pár n dimenziós, az $(\mathcal{N}, B)$ pár pedig k dimenziós sima sokaság, valamint $f : \mathcal{N} \rightarrow \mathcal{M}$ leképezés.

Az f függvény differenciálható (illetve sima) a $p \in \mathcal{M}$ pontban, ha minden p körüli $x \in A$ térkép és $f(p)$ körüli $y \in B$ térkép esetén $y \circ f \circ x^{-1} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ leképezés differenciálható (illetve végtelenszer differenciálható).

Az f függvény differenciálható (illetve sima), ha minden $p \in \mathcal{M}$ pontban differenciálható (illetve sima).

2.6. Definíció. Legyen $(\mathcal{M}, A)$ pár n dimenziós, az $(\mathcal{N}, B)$ pár pedig k dimenziós sima sokaság, valamint $f : \mathcal{N} \rightarrow \mathcal{M}$ leképezés.

Az f függvény diffeomorfizmus, ha:

1. f bijekció
2. f és f^{-1} differenciálható.

Az f sima diffeomorfizmus, ha:

1. f bijekció

2. f és f^{-1} sima.

A továbbiakban a sima sokaságokra, csak az alaphalmaz jelével hivatkozunk, nem jelöljük külön a térképek halmazát.

2.7. Definíció. Legyen $\mathcal{M}$ n dimenziós sima sokaság. Jelölje $\mathcal{F}(\mathcal{M})$ az $\mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$ sima függvények halmazát, azaz

$$\mathcal{F}(\mathcal{M}) = \{f : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R} \mid \text{Dom}(f) = \mathcal{M}, f \text{ sima}\}.$$

Adott $p \in \mathcal{M}$ esetén p pontbeli derivációnak nevezzük a $D : \mathcal{F}(\mathcal{M}) \rightarrow \mathbb{R}$ leképezést, ha minden $a, b \in \mathbb{R}$ és $f, g \in \mathcal{F}(\mathcal{M})$ függvényre

$$D(af + bg) = aD(f) + bD(g) \quad \text{és} \quad D(fg) = f(p)D(g) + D(f)g(p)$$

teljesül. A sokaság p pontbeli érintőtere, jele: $T_p\mathcal{M}$, a p pontbeli derivációnak halmaza. A sokaság érintő nyalábja $T\mathcal{M} = \bigcup_{p \in \mathcal{M}} T_p\mathcal{M}$.

Megmutatható, hogy $T_p\mathcal{M}$ n -dimenziós valós vektortér.

2.8. Definíció. Legyen $\mathcal{M}$ n dimenziós sima sokaság. Az $X : \mathcal{M} \rightarrow T\mathcal{M}$ leképezés sima vektormező, ha

1. minden $p \in \mathcal{M}$ esetén $X(p) \in T_p\mathcal{M}$,
2. minden $f \in \mathcal{F}(\mathcal{M})$ esetén a

$$Xf : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R} \quad p \mapsto (X(p))(f)$$

függvény sima. A sima vektormezők halmazát jelölje $\chi(\mathcal{M})$.

A következő definíció előtt megemlítjük, hogy adott A és B halmaz esetén az

$$F(A, B) = \{f : A \rightarrow B \mid \text{Dom}(f) \subseteq A\}$$

jelölést használjuk a függvények halmazára.

2.9. Definíció. Legyen $\mathcal{M}$ n -dimenziós sima sokaság. Egy

$$g : \mathcal{M} \rightarrow F(T\mathcal{M} \times T\mathcal{M}, \mathbb{R})$$

leképezés Riemann-metrika, ha

1. minden $p \in \mathcal{M}$ esetén $g(p) : T_p\mathcal{M} \times T_p\mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$ szimmetrikus, pozitív definit, bilineáris, nem degenerált leképezés (skaláris szorzás),

2. minden $X \in \chi(M)$ esetén a

$$g(X, X) : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R} \quad p \mapsto g(p)(X(p), X(p))$$

leképezés sima.

Az (M, g) párt Riemann-sokaságnak (vagy Riemann geometriának) nevezzük, ha $\mathcal{M}$ adott dimenziójú differenciálható sokaság és g Riemann-metrika az $\mathcal{M}$ sokaságon.

A továbbiakban adott X vektormező, illetve g Riemann-metrika $p \in \mathcal{M}$ pontbeli értékét néha az X_p illetve a g_p szimbólummal jelöljük.

Legyen $\mathcal{M}$ differenciálható sokaság, $(\mathcal{N}, g)$ Riemann-sokaság, $\varphi : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{N}$ sima leképezés és $p \in \mathcal{M}$. Ekkor minden $X \in T_p\mathcal{M}$ esetén

$$\mathcal{F}(\mathcal{N}) \rightarrow \mathbb{R} \quad f \mapsto X(f \circ \varphi)$$

$\varphi(p)$ pontbeli deriváció, vagyis φ indukál egy

$$\varphi_{*p} : T_p\mathcal{M} \rightarrow T_{\varphi(p)}\mathcal{N} \quad X \mapsto \varphi_{*p}(X)$$

leképezést, melyre minden $X_p \in T_p\mathcal{M}$ és minden $f \in \mathcal{F}(\mathcal{N})$ esetén

$$(\varphi_{*p}(X_p))f = X_p(f \circ \varphi).$$

Ezek alapján $X, Y \in T_p\mathcal{M}$ esetén képezhető

$$g_p^*(X, Y) = g_{\varphi(p)}(\varphi_{*p}X, \varphi_{*p}Y).$$

Ha φ sima diffeomorfizmus, g^* szintén Riemann-metrika, melyet a g Riemann-metrika φ szerinti visszahúzásának nevezünk, vagy még a g^* metrikát a g és φ által indukált metrikának mondjuk.

2.2. Kvantummechanikai alapfogalmak

Jelölje M_n azon $n \times n$ -es mátrixok halmazát, melynek elemei komplex számok. Kitéüntetett szerepet kapnak a pozitív definit mátrixok

$$\mathcal{M}_n^+ = \{D \in M_n \mid D = D^*, 0 < D\}$$

illetve az önadjungált mátrixok

$$M_{n,sa} = \{D \in M_n \mid D = D^*\}.$$

2.10. Definíció. Állapottérnek nevezzük adott $n \in \mathbb{N}^+$ esetén az n dimenziós komplex (illetve valós) Hilbert-téren értelmezett önadjungált, pozitív, egységnyomú operátorok halmazát. Az állapottér elemeit állapotnak vagy sűrűségi mátrixnak nevezzük.

Differenciálgeometriai szempontból egyszerűbb az állapottér belsejét tekintni, ezért az állapottérre az alábbi jelölést vezetjük be.

$$\mathcal{M}_n^{+,1} = \{D \in M_n \mid D = D^*, 0 < D, \text{Tr} D = 1\}$$

2.11. Definíció. Adott $n \in \mathbb{N}^+$ esetén mérhető fizikai mennyiségeknek (röviden fizikai mennyiségeknek) nevezzük a valós vagy komplex n dimenziós Hilbert-tér önadjungált operátorainak a halmazát.

Az $\mathcal{M}_n^{+,1}$ tér az $\mathbb{R}^{n^2-1}$ tér egy nyílt részhalmazával azonosítható, így természetes módon n^2-1 dimenziós topologikus sokaságnak tekinthető (az identitás függvénnyel, mint egyetlen globális térképpel). Egy adott $D_0 \in \mathcal{M}_n^{+,1}$ állapotban az érintőteret azonosíthatjuk a nulla nyomú, önadjungált $n \times n$ -es mátrixok halmazával, melyre a M_{sa}^0 jelölést fogjuk használni, vagyis

$$M_{n,sa}^0 = \{X \in M_n \mid D = D^*, \text{Tr} D = 0\}.$$

Ugyanis ha $X \in M_{n,sa}^0$ és $f : \mathcal{M}_n^{+,1} \rightarrow \mathbb{R}$ sima függvény akkor a

$$(Xf)(D_0) = \left. \frac{df(D_0 + tX)}{dt} \right|_{t=0}$$

leképezés deriváció.

A fizikai szempontból releváns metrikák az úgynevezett monoton metrikák. Most ezeket definiáljuk kis előkészítés után.

2.12. Definíció. Jelölje $M_m(M_n)$ azon $m \times m$ -es mátrixok halmazát, melynek elemei $n \times n$ -es mátrixok. A $T : M_n \rightarrow M_m$ lineáris leképezés pozitív, ha pozitív operátorhoz pozitív operátort rendel.

A $T : M_n \rightarrow M_m$ lineáris leképezés teljesen pozitív, ha minden $k \in \mathbb{N}^+$ esetén a

$$T^{(k)} : M_k(M_n) \rightarrow M_k(M_m) \quad [A_{ij}] \mapsto [T(A_{ij})]$$

lineáris leképezés pozitív.

A $T : M_n \rightarrow M_m$ lineáris leképezés sztochasztikus, ha megőrzi a mátrix nyomát és teljesen pozitív.

2.13. Definíció. Riemann-sokaságoknak egy $(\mathcal{M}_n^+, g^{(n)})_{n \in \mathbb{N}^+}$ rendszerét monoton metrikák családjának nevezzük, ha minden $n, m \in \mathbb{N}^+$ paraméterekre, minden $T : M(n, \mathbb{C}) \rightarrow M(m, \mathbb{C})$ stochasztikus leképezésre, minden $D \in \mathcal{M}_n$ állapotra és minden $X \in M_{sa}^0$ érintőtérbeli vektorra

$$g_{T(D)}^{(m)}(T(X), T(X)) \leq g_D^{(n)}(X, X)$$

teljesül.

2.14. Definíció. Egy $f : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ függvény operátormonoton, ha minden $n \in \mathbb{N}^+$ és $A, B \in M_n$ önadjungált mátrixra $0 < A \leq B$ esetén $f(A) \leq f(B)$ fennáll.

2.15. Definíció. Adott $D \in M_n$ mátrix esetén definiáljuk a

$L_D : M_n \rightarrow M_n$ $X \mapsto DX$ balról való szorzás és a

$R_D : M_n \rightarrow M_n$ $X \mapsto XD$ jobbról való szorzás operátorát.

2.16. Definíció. A

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : M_n \times M_n \rightarrow \mathbb{C} \quad (A, B) \mapsto \text{Tr}(A^* B)$$

skaláris szorzást nevezzük Hilbert–Schmidt-féle skaláris szorzásnak.

2.1. Állítás. Legyen $D \in M_n$ pozitív definit ($0 < D$) önadjungált mátrix. Ekkor L_D és $R_{D^{-1}}$ egymással kommutáló önadjungált operátorok, továbbá $L_D R_D^{-1}$ pozitív.

Bizonyítás. Tetszőleges $A, B \in M_n$ mátrix esetén

$$\begin{aligned} \langle A, L_D B \rangle &= \langle A, DB \rangle = \text{Tr}(A^* DB) = \text{Tr}(BA^* D^*) = \\ &= \text{Tr}(B(DA)^*) = \text{Tr}((DA)^* B) = \langle DA, B \rangle = \\ &= \langle L_D A, B \rangle, \end{aligned}$$

ami alapján L_D önadjungált. Az R_D^{-1} önadjungáltsága hasonlóan adódik. Mivel minden $A \in M_n$ esetén

$$L_D R_D^{-1}(A) = L_D(AD^{-1}) = DAD^{-1} = R_{D^{-1}}(DA) = R_{D^{-1}}L_D(A),$$

ezért L_D és $R_{D^{-1}}$ egymással felcserélhető operátorok. Ezek alapján

$$(L_D R_{D^{-1}})^* = R_{D^{-1}}^* L_D^* = R_{D^{-1}} L_D = L_D R_{D^{-1}}$$

miatt $L_D R_{D^{-1}}$ önadjungált. Mivel bármely $A \in M_n \setminus \{0\}$ esetén

$$\begin{aligned} \langle A, L_D R_{D^{-1}} A \rangle &= \langle A, D A D^{-1} \rangle = \text{Tr}(A^* D A D^{-1}) = \\ &= \text{Tr}(D^{-1/2} A^* D^{1/2} D^{1/2} A D^{-1/2}) = \text{Tr}\left((D^{1/2} A D^{-1/2})^* (D^{1/2} A D^{-1/2})\right) = \\ &= \langle D^{1/2} A D^{-1/2}, D^{1/2} A D^{-1/2} \rangle > 0, \end{aligned}$$

ezért $L_D R_{D^{-1}}$ pozitív definit. □

Ezek alapján bármely $f : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ folytonos függvény és $D \in \mathcal{M}_n$ esetén értelmes az $f(L_D R_{D^{-1}})$ kifejezés.

2.1. Tétel. *(Petz osztályozási tétele [6].) A monoton metrikák családja és az olyan operátormonoton $f : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ függvények között, melyekre minden pozitív x esetén $f(x) = x f(x^{-1})$ teljesül, létezik kölcsönösen egyértelmű megfeleltetés. Minden ilyen f függvényre a*

$$\begin{aligned} G^{(n,f)} : \mathcal{M}_n^{+,1} \times M_{n,\text{sa}}^0 \times M_{n,\text{sa}}^0 &\rightarrow \mathbb{R} & (D, X, Y) &\mapsto G_D^{(n,f)}(X, Y) \\ G_D^{(n,f)}(X, Y) &= \text{Tr}(X (R_D^{\frac{1}{2}} f(L_D R_D^{-1}) R_D^{\frac{1}{2}})^{-1}(Y)) \end{aligned} \quad (1)$$

kifejezés a $(\mathcal{M}_n^{+,1}, G^{(n,f)})_{n \in \mathbb{N}^+}$ monoton metrikák egy családját generálja. Továbbá a monoton metrikák minden családja előáll a

$$G^{(n,f)} : \mathcal{M}_n^{+,1} \times M_{n,\text{sa}}^0 \times M_{n,\text{sa}}^0 \rightarrow \mathbb{R} \quad (D, X, Y) \mapsto K_D^{(n,f)}(X, Y)$$

formában, valamely alkalmas f függvénnyel.

Többek között az alábbi operátormonoton függvények generálnak monoton metrikát.

$$\begin{aligned} f_{\text{SM}}(X) &= \frac{1+x}{2} & f_{\text{LA}}(X) &= \frac{2x}{1+x} \\ f_{\text{KM}}(X) &= \frac{x-1}{\log x} & f_{\text{K1}}(X) &= \frac{2(x-1)^2}{(1+x) \log^2 x} \\ f_{\text{K2}}(X) &= \frac{2(x-1)\sqrt{x}}{(1+x) \log x} & f_{\text{P1}}(X) &= \frac{\beta(1-\beta)(x-1)^2}{(x^\beta - 1)(x^{1-\beta} - 1)} \quad \beta \in]0, 1[\end{aligned}$$

Fontos megjegyezni az operátormonoton függvények által (1) képlettel generált met-

rika jól értelmezhető a pozitív mátrixok $\mathcal{M}_n^+$ terén a

$$G^{(n,f)} : \mathcal{M}_n^+ \times M_{n,sa} \times M_{n,sa} \rightarrow \mathbb{R} \quad (D, X, Y) \mapsto G_D^{(n,f)}(X, Y)$$

$$G_D^{(n,f)}(X, Y) = \text{Tr}(X(R_D^{\frac{1}{2}}f(L_DR_D^{-1})R_D^{\frac{1}{2}})^{-1}(Y))$$

képlettel. Az $\mathcal{M}_n^+$ tér egy részsokasága, az egységnyomú mátrixok halmaza, az állapotter. Ezen a téren diagonális állapotban a monoton metrika egyszerűen meghatározható az alábbi tétel szerint.

2.2. Tétel. [1] Tekintsük az $(\mathcal{M}_n^+, G)$ sokaságot, ahol a G monoton metrikát az f függvény generálja. Minden $x, y \in \mathbb{R}^+$ esetén legyen $m(x, y) = \frac{1}{yf\left(\frac{x}{y}\right)}$. Legyen a

$D \in \mathcal{M}_n^+$ állapot $D = \sum_{k=1}^n \lambda_k E_{kk}$ alakú.

$$\begin{aligned} \text{Ha } 1 \leq i < j \leq n, \ 1 \leq k < l \leq n, \text{ akkor: } & \begin{cases} G_D(H_{ij}, H_{kl}) = \delta_{ik}\delta_{jl}2m(\lambda_i, \lambda_j) \\ G_D(F_{ij}, F_{kl}) = \delta_{ik}\delta_{jl}2m(\lambda_i, \lambda_j) \\ G_D(H_{ij}, F_{kl}) = 0, \end{cases} \\ \text{ha } 1 \leq i < j \leq n, \ 1 \leq k \leq n, \text{ akkor: } & G_D(H_{ij}, F_{kk}) = G_D(F_{ij}, F_{kk}) = 0, \\ \text{ha } 1 \leq i \leq n, \ 1 \leq k \leq n, \text{ akkor: } & G_D(F_{ii}, F_{kk}) = \delta_{ik}4m(\lambda_i, \lambda_i) \end{aligned} \quad (2)$$

teljesül.

2.3. Mátrixfüggvények deriválása

2.17. Definíció. Legyen $f : M_n \rightarrow M_m$ és $\rho \in \text{IntDom}(f)$. Ekkor $(Df)(\rho) : M_n \rightarrow M_m$ az a lineáris leképezés, amire

$$\lim_{X \rightarrow 0} \frac{f(\rho + X) - f(\rho) - (Df)(\rho)(X)}{\|X\|} = 0$$

teljesül, ahol $\|\cdot\|$ az operátornormát jelöli.

Mivel véges dimenziós téren bármely két norma ekvivalens, ezért a definícióban bármely normát jelölheti $\|\cdot\|$, azonban itt most operátornormaként fogjuk használni.

Példák mátrixfüggvények deriválására.

1. Legyen $f : M_n \rightarrow M_n$, $f(A) = A^2$. Ekkor minden $A, X \in M_n$ esetén

$$f(A + X) - f(A) = A^2 + AX + XA + X^2 - A^2.$$

Megmutatjuk, hogy $(Df)(A)X = AX + XA$ teljesül. Valóban, ugyanis

$$\lim_{X \rightarrow 0} \left\| \frac{f(A+X) - f(A) - (Df)(A)X}{\|X\|} \right\| = \lim_{X \rightarrow 0} \frac{\|X^2\|}{\|X\|} \leq \lim_{X \rightarrow 0} \frac{\|X\|^2}{\|X\|} = 0.$$

2. Jelölje G_n az $n \times n$ -es komplex elemű invertálható mátrixok halmazát és legyen $i : G_n \rightarrow G_n$, $i(\rho) = \rho^{-1}$. Megmutatható, hogy ekkor minden $X \in M_n$ esetén

$$(Di)(\rho)(X) = -\rho^{-1}X\rho^{-1}$$

teljesül.

3. Legyen $s : \mathcal{M}_n^{+,1} \rightarrow \mathcal{M}_n^{+,1}$, $s(\rho) = \sqrt{\rho}$. Megmutatjuk, hogy minden $\rho \in \mathcal{M}_n^{+,1}$ és $X \in M_{n,sa}$ esetén

$$(Ds)(\rho)(X) = (L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1}(X).$$

Tekintsük az 1. példában definiált $f(\rho) = \rho^2$ függvényt. Ekkor nyilván minden $\rho \in \mathcal{M}_n^{+,1}$ esetén

$$\sqrt{\rho} \cdot \sqrt{\rho} = \rho,$$

vagyis $s \cdot s = \text{id}$. Ennek mindkét oldalát deriválva a ρ pontban az $X \in M_{n,sa}$ irányba

$$(Ds)(\rho)(X) \cdot \sqrt{\rho} + \sqrt{\rho} \cdot (Ds)(\rho)(X) = X$$

adódik, amit a

$$(L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})(Ds)(\rho)(X) = X$$

formában is felírhatunk. Ez pedig a bizonyítandó formulát adja vissza.

2.4. Az állapottér felbontása

Az invertálható 2×2 -es blokk-mátrixok pozitivitása jellemezhető az alábbi módon.

1. Lemma. *Legyen*

$$\rho = \begin{pmatrix} D_1 & C \\ C^* & D_2 \end{pmatrix},$$

ahol D_1 és D_2 invertálható mátrixok. Ekkor $\rho > 0$ pontosan akkor teljesül, ha $D_2 > 0$ és $D_1 - CD_2^{-1}C^* > 0$, ami pontosan akkor teljesül, ha $D_1 > 0$ és $D_2 - C^*D_1^{-1}C > 0$.

Legyen $\rho \in \mathcal{M}_{2n}^{+,1}$ az alábbi alakú.

$$\rho = \begin{pmatrix} D_1 & C \\ C^* & D_2 \end{pmatrix}$$

A $D = D_1 + D_2$ mátrix pozitív definit mátrixok összege, tehát pozitív definit, valamint $\text{Tr} D = \text{Tr} D_1 + \text{Tr} D_2 = \text{Tr} \rho = 1$ miatt egységnyomú, vagyis $D \in \mathcal{M}_n^{+,1}$.

Az $A = D_1 - D_2$ mátrixról annyit tudunk, hogy önadjungált és

$$D_1 = \frac{1}{2}(D + A) > 0 \quad D_2 = \frac{1}{2}(D - A) > 0$$

teljesül rá, amiből

$$-D < A < D$$

adódik, vagyis

$$-I < D^{-1/2} A D^{-1/2} < I.$$

Legyen

$$\mathcal{E}_n = \{X \in M_n(\mathbb{K}) \mid X = X^*, -I < X < I\}.$$

Bevezetve a $Z = D^{-1/2} A D^{-1/2}$ változót $Z \in \mathcal{E}_n$ adódik.

Ez a gondolatmenet megfordítható. Ha $Z \in \mathcal{E}_n$ és $D \in \mathcal{M}_n^{+,1}$, akkor a

$$D_1 = \frac{1}{2}(D + D^{1/2} Z D^{1/2}) > 0 \quad D_2 = \frac{1}{2}(D - D^{1/2} Z D^{1/2}) > 0$$

mátrixok lehetnek egy $\rho \in \mathcal{M}_{2n}^{+,1}$ állapot bal felső és jobb alsó blokk-mátrixai.

A 1 Lemma értelmében

$$D_1 > C D_2^{-1} C^* \quad D_2 > C^* D_1^{-1} C$$

teljesül, amiből $D_1, D_2 > 0$ miatt

$$\begin{aligned} I &> D_1^{-1/2} C D_2^{-1} C^* D_1^{-1/2} = \left(D_1^{-1/2} C D_2^{-1/2} \right) \left(D_2^{-1/2} C^* D_1^{-1/2} \right) \\ &= \left(D_1^{-1/2} C D_2^{-1/2} \right) \left(D_1^{-1/2} C D_2^{-1/2} \right)^* \\ I &> D_2^{-1/2} C^* D_1^{-1} C D_2^{-1/2} = \left(D_2^{-1/2} C^* D_1^{-1/2} \right) \left(D_1^{-1/2} C D_2^{-1/2} \right) \\ &= \left(D_1^{-1/2} C D_2^{-1/2} \right)^* \left(D_1^{-1/2} C D_2^{-1/2} \right) \end{aligned}$$

Bevezetve az $X = D_1^{-1/2}CD_2^{-1/2}$ jelölést az

$$I > X^*X \quad I > XX^*$$

egyenleteket kapjuk.

2. Lemma. *Legyen X tetszőleges $n \times n$ -es mátrix. Ekkor*

$$I > X^*X \quad \leftrightarrow \quad \|X\| < 1$$

teljesül, ahol $\|\cdot\|$ a mátrix operátornormáját jelöli.

Vezessük be

$$\mathcal{B}_1(n) = \{X \in M_n(\mathbb{C}) \mid \|X\| < 1\}$$

jelölést. Tehát $\mathcal{B}_1(n)$ jelöli az állapotter azon mátrixait, melyeknek az operátornormája kisebb mint 1.

Ezek alapján $X = D_1^{-1/2}CD_2^{-1/2} \in \mathcal{B}_1(n)$.

Megfordítva ezt a gondolatmenetet, ha $X \in \mathcal{B}_1(n)$, akkor $C = D_1^{1/2}XD_2^{1/2}$ lehet azon blokk-mátrix 12 eleme, melynek 11 eleme D_1 és a 22 eleme D_2 .

2.3. Tétel. *Tekintsük a $\varphi : \mathcal{M}_n^+ \times \mathcal{E}_n \times \mathcal{B}_1(n) \rightarrow \mathcal{M}_{2n}^+$*

$$\varphi(D, A, X) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{D}(1+A)\sqrt{D} & (\sqrt{D}(1+A)\sqrt{D})^{1/2}X(\sqrt{D}(1-A)\sqrt{D})^{1/2} \\ (\cdot)^* & \sqrt{D}(1-A)\sqrt{D} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

függvényt, ahol a mátrix 21 eleme az 12 elem adjungáltja. Ekkor φ diffeomorfizmus a $\mathcal{M}_n^{+,1} \times \mathcal{E}_n \times \mathcal{B}_1(n)$ és a $\mathcal{M}_{2n}^{+,1}$ sokaság között. Továbbá φ megszorítása az $\Omega = \mathcal{M}_n^{+,1} \times \mathcal{E}_n \times \mathcal{B}_1(n)$ halmazra

$$\varphi|_{\Omega} : \mathcal{M}_n^{+,1} \times \mathcal{E}_n \times \mathcal{B}_1(n) \rightarrow \mathcal{M}_{2n}^{+,1}$$

szintén diffeomorfizmus.

A $\varphi : \mathcal{M}_n^+ \times \mathcal{E}_n \times \mathcal{B}_1(n) \rightarrow \mathcal{M}_{2n}^+$ leképezés minden $(\rho, A, X) \in \mathcal{M}_n^+ \times \mathcal{E}_n \times \mathcal{B}_1(n)$ pontban indukál egy

$$\varphi_{*\rho} : T_{\rho}\mathcal{M}_n^+ \times T_A\mathcal{E}_n \times T_X\mathcal{B}_1(n) \rightarrow T_{\varphi(\rho,A,X)}\mathcal{M}_{2n}^+$$

leképezést, amely lineáris vektortér izomorfizmus. Az érintőtereket mátrixterekkel

azonosítva a fenti leképezés a

$$\varphi_{*\rho} : M_{n,sa} \times M_{n,sa} \times M_n \rightarrow M_{2n,sa}$$

formában is felírható. Ahhoz, hogy bázist adhassunk meg az érintőtérben szükségünk lesz a az alábbi speciális mátrixokra. Jelölje E_{ij} azt a mátrixot, melynek az ij eleme 1, a többi pedig 0, továbbá legyen

$$F_{ij} = E_{ij} + E_{ji} \quad \text{és} \quad H_{ij} = iE_{ij} - iE_{ji}.$$

Minden $\rho \in \mathcal{M}_n^+$ és $A \in \mathcal{E}_n$ esetén a $T_\rho \mathcal{M}_n^+$ és a $T_A \mathcal{E}_n$ terek egy bázisát adja az $(F_{ij})_{1 \leq i \leq j \leq n}, (H_{ij})_{1 \leq i < j \leq n}$ vektorrendszer; továbbá minden $X \in \mathcal{B}_1(n)$ esetén $T_X \mathcal{B}_1(n)$ egy bázisát adja az $(E_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}, (iE_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ vektorrendszer. Természetesen ezen terek dimenziószáma kiadja $T_{\varphi(\rho, A, X)} \mathcal{M}_{2n}^+$ dimenzióját

$$n^2 + n^2 + 2n^2 = (2n)^2.$$

3. Új eredmények

3.1. Monoton metrikák unitér invarianciája

A $D \in \mathcal{M}_n^+$ operátor sajátértékeinek a halmazát jelölje $\text{Sp}(D) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$. Mivel $0 < D$, vagyis D minden sajátértéke pozitív, ezért az $L_D R_D^{-1}$ operátornak is pozitív minden sajátértéke, ugyanis

$$\text{Sp}(L_D R_D^{-1}) = \left\{ \lambda_1, \dots, \lambda_n, \frac{1}{\lambda_1}, \dots, \frac{1}{\lambda_n} \right\}.$$

Mivel $0 < x$ esetén $f(x) \neq 0$, ezért a $h : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$, $h(x) = \frac{1}{f(x)}$ függvény bevezetésével

$$G_D^{m,f}(X, Y) = \text{Tr} \left(X (R_D^{-\frac{1}{2}} h(L_D R_D^{-1}) R_D^{-\frac{1}{2}}) (Y) \right)$$

adódik a metrikára, amit a

$$G_D^{m,f}(X, Y) = \text{Tr} \left(X (h(L_D R_D^{-1}) (Y D^{-1/2})) D^{-1/2} \right)$$

alakban is felírhatunk. Tetszőleges U unitér mátrix és $n \in \mathbb{N}^+$ esetén

$$\begin{aligned} (L_{UDU^*} R_{UDU^*}^{-1})^n (UYU^* (UDU^*)^{-1/2}) &= (L_{UDU^*} R_{UDU^*}^{-1})^n (UY D^{-1/2} U^*) = \\ &= (L_{UD^n U^*} R_{UD^n U^*}^{-1}) (UY D^{-1/2} U^*) = U D^n U^* UY D^{-1/2} U^* U D^{-n} U^* = \\ &= U (D^n Y D^{-1/2} D^{-n}) U^* = U ((L_{D^n} R_{D^n}^{-1}) (Y D^{-1/2})) U^* = \\ &= U ((L_D R_D^{-1})^n (Y D^{-1/2})) U^* \end{aligned}$$

adódik.

Mivel a $h(L_D R_D^{-1})$ operátor meghatározásához csak az $L_D R_D^{-1}$ operátor sajátértékeiben kell ismerni a h függvény értékeit, ezért rögzített d esetén a h függvény helyettesíthető egy olyan $p(x) = \sum_{k=1}^m a_k x^k$ polinommal, melyre

$$\forall x \in \left\{ \lambda_1, \dots, \lambda_n, \frac{1}{\lambda_1}, \dots, \frac{1}{\lambda_n} \right\} : \quad h(x) = p(x)$$

teljesül. Ekkor viszont a fenti formula alapján

$$\begin{aligned}
h(L_{UDU^*} R_{UDU^*}^{-1})(UYU^*(UDU^*)^{-1/2}) &= p(L_{UDU^*} R_{UDU^*}^{-1})(UYU^*(UDU^*)^{-1/2}) = \\
&= \sum_{k=1}^m a_k (L_{UDU^*} R_{UDU^*}^{-1})^k (UYU^*(UDU^*)^{-1/2}) = \\
&= \sum_{k=1}^m a_k U ((L_D R_D^{-1})^k (Y D^{-1/2})) U^* = \\
&= U \left(\left(\sum_{k=1}^m a_k (L_D R_D^{-1})^k \right) (Y D^{-1/2}) \right) U^* = U (p(L_D R_D^{-1})(Y D^{-1/2})) U^* = \\
&= U (h(L_D R_D^{-1})(Y D^{-1/2})) U^*
\end{aligned}$$

teljesül. Ebből viszont a metrika unitér invarianciája adódik az alábbi egyenlőségek alapján.

$$\begin{aligned}
G_{UDU^*}^{n,f}(UXU^*, UYU^*) &= \\
\text{Tr}(UXU^* (h(L_{UDU^*} R_{UDU^*}^{-1})(UYU^*(UDU^*)^{-1/2})) (UDU^*)^{-1/2}) &= \\
= \text{Tr}(UXU^* (U (h(L_D R_D^{-1})(Y D^{-1/2})) U^*) (UDU^*)^{-1/2}) &= \\
= \text{Tr}(UX (h(L_D R_D^{-1})(Y D^{-1/2})) D^{-1/2} U^*) &= \\
= \text{Tr}(X (h(L_D R_D^{-1})(Y D^{-1/2})) D^{-1/2}) &= \\
= G_D^{n,f}(X, Y)
\end{aligned}$$

Eredményünket az alábbi tételben foglalhatjuk össze.

3.1. Tétel. Minden $n \in \mathbb{N}^+$ esetén az $\mathcal{M}_n^+$ sokaságon minden $G^{n,f}$ monoton metrikára minden $D \in \mathcal{M}_n^+$ pontban és minden $X, Y \in \mathcal{M}_{n,\text{sa}}$ értintővektorra minden U $n \times n$ -es unitér mátrixra

$$G_{UDU^*}^{n,f}(UXU^*, UYU^*) = G_D^{n,f}(X, Y)$$

teljesül.

Ezek alapján elég diagonális D állapotokban ismerni a metrika értékeit.

3.2. A φ függvény deriválása

A következőkben a 2.3 tételben szereplő mátrixfüggvények deriváltjait fogjuk kiszámolni. Ehhez a függvényeket kisebb egységekre osztjuk, majd ezeket a kisebb részeket deriváljuk a különböző változók szerint, majd ezekből képezzük a teljes

függvény deriváltját.

Először adott $A \in \mathcal{E}_n$ mellett tekintsük az

$$f_1 : \mathcal{M}_n^+ \rightarrow \mathcal{M}_n^+ \quad \rho \mapsto \sqrt{\rho}(1 + A)\sqrt{\rho}$$

függvényt.

A mátrixfüggvények deriválása során az olyan jól ismert deriválási szabályok, mint például az összetett vagy szorzat függvény deriválási szabályai érvényben maradnak.

Ezek alapján az f_1 függvény ρ szerinti deriváltja a $V_\rho \in M_{n,sa}$ irányban a következőképp számolható.

$$\begin{aligned} (Df_1)(\rho)(V_\rho) &= \left((L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1} (V_\rho) \right) (1 + A)\sqrt{\rho} + \\ &\quad + \sqrt{\rho}(1 + A) \left((L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1} (V_\rho) \right) \end{aligned} \quad (4)$$

Most adott $\rho \in \mathcal{M}_n^+$ esetén definiáljuk az alábbi függvényt.

$$f_2 : \mathcal{E}_n \rightarrow \mathcal{M}_n^+ \quad A \mapsto \sqrt{\rho}(1 + A)\sqrt{\rho}$$

Az f_2 függvényben az A szerinti deriváltban a ρ változók konstansnak tekinthetők, így ebben az esetben nem kell szorzat függvényt deriválni. Az f_2 függvény $V_A \in M_{n,sa}$ iránymenti deriváltja

$$(Df_2)(A)(V_A) = \sqrt{\rho}V_A\sqrt{\rho}. \quad (5)$$

Legyen $\alpha_1 : \mathcal{M}_n^+ \times \mathcal{E}_n \times \mathcal{B}_1(n) \rightarrow \mathcal{M}_n^+$ a

$$\alpha_1(\rho, A, X) = \sqrt{\rho}(1 + A)\sqrt{\rho}$$

függvény.

Ekkor α_1 függvény deriváltja a különböző változók szerinti deriváltak összegeként megkapható

$$\begin{aligned} (D\alpha_1)(\rho, A, X)(V_\rho, V_A, V_X) &= \left((L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1} (V_\rho) \right) (1 + A)\sqrt{\rho} + \\ &\quad + \sqrt{\rho}(1 + A) \left((L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1} (V_\rho) \right) + \sqrt{\rho}V_A\sqrt{\rho}, \end{aligned}$$

ahol $V_\rho, V_X \in M_{n,sa}$ és $V_A \in M_n$.

Az

$$\alpha_2 : \mathcal{M}_n^+ \times \mathcal{E}_n \times \mathcal{B}_1(n) \rightarrow \mathcal{M}_n^+ \quad (\rho, A, X) \mapsto \sqrt{\rho}(1 - A)\sqrt{\rho}$$

függvény deriváltja az α_1 függvény deriváltjához hasonlóan számolható, vagyis minden $V_\rho, V_X \in M_{n,sa}$ és $V_X \in M_n$ esetén

$$\begin{aligned} (D\alpha_2)(\rho, A, X)(V_\rho, V_A, V_X) &= \left((L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1} (V_\rho) \right) (1 - A)\sqrt{\rho} + \\ &\quad + \sqrt{\rho}(1 - A) \left((L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1} (V_\rho) \right) - \sqrt{\rho}V_A\sqrt{\rho}. \end{aligned}$$

Eddig meghatároztuk a (3) képletben szereplő mátrix 11 és 22 elemének a deriváltját. Most az 12 elemét deriváljuk különböző változók szerint.

Legyen $A \in \mathcal{E}_n$ és $X \in \mathcal{B}_1(n)$ rögzített és tekintsük a

$$g_1 : \mathcal{M}_n^+ \rightarrow M_n \quad \rho \mapsto (\sqrt{\rho}(1 + A)\sqrt{\rho})^{1/2} X (\sqrt{\rho}(1 - A)\sqrt{\rho})^{1/2}$$

függvényt. A könnyebb és nyomonkövethetőbb számítások miatt a g_1 függvényt bontsuk fel a és b részekre a következőképpen.

Legyen $a = \sqrt{\sqrt{\rho}(1 + A)\sqrt{\rho}}$ és $b = \sqrt{\sqrt{\rho}(1 - A)\sqrt{\rho}}$. Ekkor a szorzat és az összetett függvény deriválási szabályait felhasználva a következőt kapjuk tetszőleges $V_\rho \in M_{n,sa}$ mátrixra.

$$\begin{aligned} (Da)(\rho)(V_\rho) &= (L_{\sqrt{\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho}}} + R_{\sqrt{\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho}}})^{-1} (((L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1}(V_\rho) \cdot \\ &\quad \cdot (1 + A)\sqrt{\rho}) + \sqrt{\rho}(1 + A)(L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1}(V_\rho)) \\ (Db)(\rho)(V_\rho) &= (L_{\sqrt{\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho}}} + R_{\sqrt{\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho}}})^{-1} (((L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1}(V_\rho) \cdot \\ &\quad \cdot (1 - A)\sqrt{\rho}) + \sqrt{\rho}(1 - A)(L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1}(V_\rho)) \end{aligned}$$

Mivel

$$(Dg_1)(\rho)(V_\rho) = (Da)(\rho)(V_\rho)Xb + aX(Db)(\rho)(V_\rho),$$

ezért az előbbieken kiszámolt deriváltak alapján

$$\begin{aligned} (Dg_1)(\rho)(V_\rho) &= [(L_{\sqrt{\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho}}} + R_{\sqrt{\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho}}})^{-1} (((L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1}(V_\rho) \cdot \\ &\quad \cdot (1 + A)\sqrt{\rho}) + \sqrt{\rho}(1 + A)(L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1}(V_\rho))] X \sqrt{\sqrt{\rho}(1 - A)\sqrt{\rho}} + \\ &\quad + \sqrt{\sqrt{\rho}(1 + A)\sqrt{\rho}} X [(L_{\sqrt{\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho}}} + R_{\sqrt{\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho}}})^{-1} (((L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1}(V_\rho) \cdot \\ &\quad \cdot (1 - A)\sqrt{\rho}) + \sqrt{\rho}(1 - A)(L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1}(V_\rho))] \end{aligned}$$

adódik.

Most legyen $\rho \in \mathcal{M}_n^+$ és $X \in \mathcal{B}_1(n)$ rögzített, valamint legyen

$$g_2 : \mathcal{E}_n \rightarrow M_n \quad A \mapsto (\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho})^{1/2} X (\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho})^{1/2}.$$

A g_2 függvény deriváltját a g_1 függvényhez hasonló módon számolhatjuk, vagyis tetszőleges $V_A \in M_{n,sa}$ esetén

$$\begin{aligned} (Dg_2)(A)(V_A) = & \left[(L\sqrt{\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho}} + R\sqrt{\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho}})^{-1} (\sqrt{\rho}(V_A)\sqrt{\rho}) \right] X \sqrt{\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho}} + \\ & + \sqrt{\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho}} X \left[(L\sqrt{\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho}} + R\sqrt{\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho}})^{-1} (\sqrt{\rho}(-V_A)\sqrt{\rho}) \right]. \end{aligned}$$

Végül adott $\rho \in \mathcal{M}_n^+$ és $A \in \mathcal{E}_n$ esetén legyen

$$g_3 : \mathcal{B}_1(n) \rightarrow M_n \quad X \mapsto (\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho})^{1/2} X (\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho})^{1/2}.$$

Mivel g_3 függvényben a tényezők között csak egy helyen szerepel az X változó így az X szerinti deriváltját könnyen megkaphatjuk tetszőleges $V_X \in M_n$ mátrixra.

$$(Dg_3)(X)(V_X) = (\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho})^{1/2} V_X (\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho})^{1/2}$$

A g_1 , g_2 és g_3 függvény deriváltjából összerakhatjuk a (3) képletben szereplő mátrix 12 elemének a deriváltját. Ha

$$\alpha_3 : \mathcal{M}_n^+ \times \mathcal{E}_n \times \mathcal{B}_1(n) \rightarrow M_n \quad (\rho, A, X) \mapsto (\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho})^{1/2} X (\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho})^{1/2},$$

akkor az α_3 függvény deriváltját előbbieken kiszámolt segédfüggvények deriváltjainak összegeként kapjuk. Vagyis minden $V_\rho, V_A \in M_{n,sa}$ és $V_X \in M_n$ esetén

$$\begin{aligned} (D\alpha_3)(\rho, A, X)(V_\rho, V_A, V_X) = & (Dg_1)(\rho)(V_\rho) + (Dg_2)(A)(V_A) + (Dg_3)(X)(V_X) = \\ = & [(L\sqrt{\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho}} + R\sqrt{\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho}})^{-1} ((L\sqrt{\rho} + R\sqrt{\rho})^{-1}(V_\rho) \cdot \\ & \cdot (1+A)\sqrt{\rho}) + \sqrt{\rho}(1+A)(L\sqrt{\rho} + R\sqrt{\rho})^{-1}(V_\rho)] X \sqrt{\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho}} + \\ & + \sqrt{\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho}} X [(L\sqrt{\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho}} + R\sqrt{\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho}})^{-1} ((L\sqrt{\rho} + R\sqrt{\rho})^{-1}(V_\rho) \cdot \\ & \cdot (1-A)\sqrt{\rho}) + \sqrt{\rho}(1-A)(L\sqrt{\rho} + R\sqrt{\rho})^{-1}(V_\rho)] \\ & [(L\sqrt{\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho}} + R\sqrt{\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho}})^{-1} (\sqrt{\rho}(V_A)\sqrt{\rho})] \cdot X \sqrt{\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho}} + \\ & + \sqrt{\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho}} X [(L\sqrt{\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho}} + R\sqrt{\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho}})^{-1} (\sqrt{\rho}(-V_A)\sqrt{\rho})] \\ & (\sqrt{\rho}(1+A)\sqrt{\rho})^{1/2} X (\sqrt{\rho}(1-A)\sqrt{\rho})^{1/2}. \end{aligned}$$

3.3. A felbontásban szereplő komponenseken indukált metrika

A 3.1 tétel alapján elég diagonális alappontokban ismerni a monoton metrikát, akkor már minden egyéb pontban kiszámolható. Diagonális állapotot pontosan akkor kapunk, ha ρ és A diagonális, valamint $X = 0$. Tehát ha ilyen pontokban ismerjük a metrikát, akkor már bármely más pontban is meghatározható az értéke. A továbbiakban tegyük fel, hogy ρ és A diagonális a

$$\rho_{ij} = \delta_{ij}\rho_i \quad A_{ij} = \delta_{ij}A_i$$

mátrixelemekkel, valamint $X = 0$.

A metrika kiszámolásához az alábbi, könnyen ellenőrizhető, egyenlőségeket fogjuk használni. Ha η pozitív diagonális mátrix az $\eta_{ij} = \delta_{ij}\eta_i$ mátrixelemekkel, akkor

$$\begin{aligned} (L_{\sqrt{\eta}} + R_{\sqrt{\eta}})^{-1}(E_{ij}) &= \frac{1}{\sqrt{\eta_i} + \sqrt{\eta_j}} E_{ij} \\ E_{ij}\eta &= \eta_j E_{ij} \\ \eta E_{ij} &= \eta_i E_{ij} \\ F_{ij}\eta + \eta F_{ij} &= (\eta_i + \eta_j) F_{ij} \\ H_{ij}\eta + \eta H_{ij} &= (\eta_i + \eta_j) H_{ij} \end{aligned}$$

Először meghatározzuk $(D\varphi)(\rho, A, 0)(E_{ij}, 0, 0)$ értékét. A $(D\varphi)(\rho, A, 0)(E_{ij}, 0, 0)$ blokkmátrix 11 elemét $(Df_1)(\rho)(E_{ij})$ adja meg, ami a (4) képlet alapján az alábbi módon határozható meg.

$$\begin{aligned} &\left((L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1}(E_{ij}) \right) (1 + A)\sqrt{\rho} + \sqrt{\rho}(1 + A) \left((L_{\sqrt{\rho}} + R_{\sqrt{\rho}})^{-1}(E_{ij}) \right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_j}} E_{ij} (1 + A)\sqrt{\rho} + \sqrt{\rho}(1 + A) \frac{1}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_j}} E_{ij} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_j}} \left((1 + A_i)\sqrt{\rho_i} + (1 + A_j)\sqrt{\rho_j} \right) E_{ij} = \\ &= \left(1 + \frac{A_i\sqrt{\rho_i} + A_j\sqrt{\rho_j}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_j}} \right) E_{ij} \end{aligned}$$

A $(D\varphi)(\rho, A, 0)(E_{ij}, 0, 0)$ blokkmátrix 12 és 21 eleme 0, mivel $X = 0$. A 22 elem pedig az 11 elemből kapható A előjelének megváltoztatásával.

Ezek alapján

$$\begin{aligned}
(D\varphi)(\rho, A, 0)(F_{ij}, 0, 0) &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{A_i\sqrt{\rho_i} + A_j\sqrt{\rho_j}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_j}}\right) F_{ij} & 0 \\ 0 & \left(1 - \frac{A_i\sqrt{\rho_i} + A_j\sqrt{\rho_j}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_j}}\right) F_{ij} \end{pmatrix} \\
(D\varphi)(\rho, A, 0)(H_{ij}, 0, 0) &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{A_i\sqrt{\rho_i} + A_j\sqrt{\rho_j}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_j}}\right) H_{ij} & 0 \\ 0 & \left(1 - \frac{A_i\sqrt{\rho_i} + A_j\sqrt{\rho_j}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_j}}\right) H_{ij} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{6}$$

Most $(D\varphi)(\rho, A, 0)(0, E_{ij}, 0)$ értékét számoljuk ki. A $(D\varphi)(\rho, A, 0)(0, E_{ij}, 0)$ blokkmátrix 11 elemét $(Df_2)(A)(E_{ij})$ adja meg, ami az (5) képlet alapján az alábbi módon határozható meg.

$$\sqrt{\rho}E_{ij}\sqrt{\rho} = \sqrt{\rho_i\rho_j}E_{ij}$$

A $(D\varphi)(\rho, A, 0)(0, E_{ij}, 0)$ blokkmátrix 12 és 21 eleme szintén 0, mivel $X = 0$. A 22 elem pedig az 11 elemnek a (-1) -szerese. Vagyis

$$\begin{aligned}
(D\varphi)(\rho, A, 0)(0, F_{ij}, 0) &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{\rho_i\rho_j}F_{ij} & 0 \\ 0 & -\sqrt{\rho_i\rho_j}F_{ij} \end{pmatrix} \\
(D\varphi)(\rho, A, 0)(0, H_{ij}, 0) &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{\rho_i\rho_j}H_{ij} & 0 \\ 0 & -\sqrt{\rho_i\rho_j}H_{ij} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{7}$$

Végül $(D\varphi)(\rho, A, 0)(0, 0, E_{ij})$ értéke az eddigiek alapján

$$(D\varphi)(\rho, A, 0)(0, 0, E_{ij}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\rho_i\rho_j(1+A_i)(1-A_j)}E_{ij} \\ \sqrt{\rho_i\rho_j(1+A_i)(1-A_j)}E_{ji} & 0 \end{pmatrix} \tag{8}$$

$$\begin{aligned}
(D\varphi)(\rho, A, 0)(0, 0, iE_{ij}) &= \\
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & i\sqrt{\rho_i\rho_j(1+A_i)(1-A_j)}E_{ij} \\ -i\sqrt{\rho_i\rho_j(1+A_i)(1-A_j)}E_{ji} & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

A $\varphi : \mathcal{M}_n^{+,1} \times \mathcal{E}_n \times \mathcal{B}_1(n) \rightarrow \mathcal{M}_{2n}^{+,1}$ leképezés minden $(\rho, A, X) \in \mathcal{M}_n^{+,1} \times \mathcal{E}_n \times \mathcal{B}_1(n)$ pontban indukál egy

$$\varphi_{*\rho} : T_\rho \mathcal{M}_n^{+,1} \times T_A \mathcal{E}_n \times T_X \mathcal{B}_1(n) \rightarrow T_{\varphi(\rho, A, X)} \mathcal{M}_{2n}^{+,1}$$

leképezést, amely lineáris vektortér izomorfizmus. Ahhoz, hogy bázist adhassunk meg az érintőtérben szükségünk lesz a az alábbi speciális mátrixokra. Jelölje E_{ij} azt

a mátrixot, melynek az ij eleme 1, a többi pedig 0, továbbá legyen

$$F_{ij} = E_{ij} + E_{ji} \quad \text{és} \quad H_{ij} = iE_{ij} - iE_{ji}.$$

Minden $\rho \in \mathcal{M}_n^{+,1}$ és $A \in \mathcal{E}_n$ esetén a $T_\rho \mathcal{M}_n^{+,1}$ és a $T_A \mathcal{E}_n$ terek egy bázisát adja az $(F_{ij})_{1 \leq i \leq j \leq n}, (H_{ij})_{1 \leq i < j \leq n}$ vektorrendszer; továbbá minden $X \in \mathcal{B}_1(n)$ esetén $T_X \mathcal{B}_1(n)$ egy bázisát adja az $(F_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}, (H_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ vektorrendszer. Természetesen ezen terek dimenziószáma kiadja $T_{\varphi(\rho, A, X)} \mathcal{M}_{2n}^{+,1}$ dimenzióját

$$(n^2 - 1) + n^2 + 2n^2 = (2n)^2 - 1.$$

A $D = \varphi(\rho, A, 0)$ állapot diagonális az $\mathcal{M}_{2n}^{+,1}$ térben, blokkmátrix alakban számolva az 11 elemének ii eleme $\lambda_i = \frac{\rho_i(1 + A_i)}{2}$ és a 22 elemének ii eleme $\lambda'_i = \frac{\rho_i(1 - A_i)}{2}$

Legyen $\eta_{ij} = \frac{A_i \sqrt{\rho_i} + A_j \sqrt{\rho_j}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_j}}$. Ekkor a 2.2 tétel alapján kiszámolhatjuk a (6), a (7) és a (8) képleben szereplő blokk-mátrixok G^f metrika szerinti belső szorzatát, melyek a visszahúzott metrika komponenseit adják. A nem nulla mátrixszorzatok az alábbiak.

$$\begin{aligned} G_{\rho, A, 0}^* ((F_{ij}, 0, 0), (F_{ij}, 0, 0)) &= \frac{1}{4}(1 + \eta_{ij})^2 G_D(F_{ij}, F_{ij}) + \\ &\quad + \frac{1}{4}(1 - \eta_{ij})^2 G_D(F_{(n+i)(n+j)}, F_{(n+i)(n+j)}) = \\ &= \frac{(1 + \eta_{ij})^2}{2} m(\lambda_i, \lambda_j) + \frac{(1 - \eta_{ij})^2}{2} m(\lambda'_i, \lambda'_j) \\ G_{\rho, A, 0}^* ((0, F_{ij}, 0), (0, F_{ij}, 0)) &= \frac{1}{4} \rho_i \rho_j G_D(F_{ij}, F_{ij}) + \\ &\quad + \frac{1}{4} \rho_i \rho_j G_D(F_{(n+i)(n+j)}, F_{(n+i)(n+j)}) = \\ &= \frac{\rho_i \rho_j}{2} m(\lambda_i, \lambda_j) + \frac{\rho_i \rho_j}{2} m(\lambda'_i, \lambda'_j) \\ G_{\rho, A, 0}^* ((F_{ij}, 0, 0), (0, F_{ij}, 0)) &= \frac{1}{4} \sqrt{\rho_i \rho_j} (1 + \eta_{ij}) G_D(F_{ij}, F_{ij}) - \\ &\quad - \frac{1}{4} \sqrt{\rho_i \rho_j} (1 - \eta_{ij}) G_D(F_{(n+i)(n+j)}, F_{(n+i)(n+j)}) = \\ &= \frac{\sqrt{\rho_i \rho_j} (1 + \eta_{ij})}{2} m(\lambda_i, \lambda_j) - \frac{\sqrt{\rho_i \rho_j} (1 - \eta_{ij})}{2} m(\lambda'_i, \lambda'_j) \\ G_{\rho, A, 0}^* ((0, 0, E_{ij}), (0, 0, E_{ij})) &= \frac{1}{4} \rho_i \rho_j (1 + A_i)(1 - A_j) G_D(F_{i(n+j)}, F_{i(n+j)}) = \\ &= \frac{\rho_i \rho_j (1 + A_i)(1 - A_j)}{2} m(\lambda_i, \lambda'_j). \end{aligned}$$

Ezen eredményünket az alábbi tételben foglaljuk össze.

3.2. Tétel. Legyen $f : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$ olyan operátormonoton függvény, mely monoton metrikát generál. Legyen $\rho \in \mathcal{M}_n^{+,1}$ diagonális a $\rho_{ij} = \delta_{ij}\rho_i$ elemekkel és $A \in \mathcal{E}_n$ diagonális az $A_{ij} = \delta_{ij}A_i$. Vezessük be a $\lambda_i = \frac{\rho_i(1+A_i)}{2}$, a $\lambda'_i = \frac{\rho_i(1-A_i)}{2}$ és az $\eta_{ij} = \frac{A_i\sqrt{\rho_i} + A_j\sqrt{\rho_j}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_j}}$ jelölést, továbbá legyen $m(x, y) = \frac{1}{yf\left(\frac{x}{y}\right)}$. Jelölje G^* az

$\mathcal{M}_{2n}^{+,1}$ téren az f függvény által meghatározott monoton metrikának a visszahúzását az $\mathcal{M}_n^{+,1} \times \mathcal{E}_n \times \mathcal{B}_1(n)$ térre. Ekkor a $(\rho, A, 0) \in \mathcal{M}_n^{+,1} \times \mathcal{E}_n \times \mathcal{B}_1(n)$ pontban G^* értékeit értékei a mátrixegységekből álló bázisban az alábbiak.

1. A nemnulla értékek valós mátrixokon a következők.

$$\begin{aligned} G_{\rho,A,0}^*((F_{ij}, 0, 0), (F_{kl}, 0, 0)) &= \delta_{ik}\delta_{jl} \left(\frac{(1+\eta_{ij})^2}{2} m(\lambda_i, \lambda_j) + \frac{(1-\eta_{ij})^2}{2} m(\lambda'_i, \lambda'_j) \right) \\ G_{\rho,A,0}^*((0, F_{ij}, 0), (0, F_{kl}, 0)) &= \delta_{ik}\delta_{jl} \frac{\rho_i\rho_j}{2} (m(\lambda_i, \lambda_j) + m(\lambda'_i, \lambda'_j)) \\ G_{\rho,A,0}^*((F_{ij}, 0, 0), (0, F_{kl}, 0)) &= \delta_{ik}\delta_{jl} \frac{\sqrt{\rho_i\rho_j}}{2} ((1+\eta_{ij})m(\lambda_i, \lambda_j) - (1-\eta_{ij})m(\lambda'_i, \lambda'_j)) \\ G_{\rho,A,0}^*((0, 0, E_{ij}), (0, 0, E_{kl})) &= \delta_{ik}\delta_{jl} \frac{\rho_i\rho_j(1+A_i)(1-A_j)}{2} m(\lambda_i, \lambda'_j). \end{aligned}$$

2. A komplex mátrixegységek hasonlóan viselkednek mint a valósak.

$$\begin{aligned} G_{\rho,A,0}^*((H_{ij}, 0, 0), (H_{kl}, 0, 0)) &= G_{\rho,A,0}^*((F_{ij}, 0, 0), (F_{kl}, 0, 0)) \\ G_{\rho,A,0}^*((0, H_{ij}, 0), (0, H_{kl}, 0)) &= G_{\rho,A,0}^*((0, F_{ij}, 0), (0, F_{kl}, 0)) \\ G_{\rho,A,0}^*((H_{ij}, 0, 0), (0, H_{kl}, 0)) &= G_{\rho,A,0}^*((F_{ij}, 0, 0), (0, F_{kl}, 0)) \\ G_{\rho,A,0}^*((0, 0, iE_{ij}), (0, 0, iE_{kl})) &= G_{\rho,A,0}^*((0, 0, E_{ij}), (0, 0, E_{kl})) \end{aligned}$$

3. Az összes többi mátrixegység belső szorzata 0.

$$\begin{aligned} G_{\rho,A,0}^*((F_{ij}, 0, 0), (H_{kl}, 0, 0)) &= G_{\rho,A,0}^*((F_{ij}, 0, 0), (0, H_{kl}, 0)) = 0 \\ G_{\rho,A,0}^*((F_{ij}, 0, 0), (0, 0, E_{ij})) &= G_{\rho,A,0}^*((F_{ij}, 0, 0), (0, 0, iE_{ij})) = 0 \\ G_{\rho,A,0}^*((0, F_{ij}, 0), (0, H_{kl}, 0)) &= G_{\rho,A,0}^*((0, F_{ij}, 0, 0), (0, 0, E_{ij})) = 0 \\ G_{\rho,A,0}^*((0, F_{ij}, 0), (0, 0, iE_{ij})) &= 0 \\ G_{\rho,A,0}^*((0, 0, E_{ij}), (0, 0, iE_{kl})) &= 0 \end{aligned}$$

4. Konkluzió

A qubit-qubit rendszer esetén az összefonódottsági valószínűség meghatározásához az $\mathcal{M}_4^{+,1}$ téren való integrálást fel lehet bontani

$$\int_{\mathcal{M}_4^{+,1}} \dots d(D) = \int_{\mathcal{M}_2^{+,1}} \int_{\mathcal{E}_2} \int_{\mathcal{B}_1(2)} \dots d(X) d(A) d(\rho)$$

módon, ahol ráadásul a $\int_{\mathcal{M}_2^{+,1}}$ integrál még el is hagyható [5]. A 3.2 tételből látszik,

hogy a $\mathcal{B}_1(n)$ tér szerint szépen faktorizálható a szorzatmérték, és így az invariáns térfogati sűrűségfüggvény is, hiszen ez a térrész ortogonális a másik két érintőtérre, ezért a fenti felbontás használható lesz abban az esetben is, amikor az állapotteret monoton metrikával látjuk el.

A jelen dolgozat kereteit meghaladó távlati tervben szerepel, hogy az [5] publikációban részletesen leírt számolást végigvigyük tetszőleges monoton metrikára és így legalább a qubit-qubit rendszer esetén, fizikailag releváns térfogati mértékek szerint meg tudjuk mondani, hogy az állapotok hány százaléka összefonódott és ezzel részben meg tudjuk válaszolni Życzkowski 1998-ban feltett kérdését.

5. Köszönetnyilvánítás

Köszönöm a téma elsajátításához szükséges rengeteg külön elméleti foglalkozást, valamint a dolgozat megírásához nyújtott segítségét témavezetőmnek, Dr. Andai Attilának.

Hivatkozások

- [1] Attila Andai. *Information Geometry in Quantum Mechanics*. PhD thesis, BUTE, Applied Mathematics, 2003.
- [2] Charles F. Dunkl and Paul B. Slater. Separability probability formulas and their proofs for generalized two-qubit X-matrices endowed with Hilbert–Schmidt and induced measures. *Random Matrices: Theory and Applications*, 4(04):1550018, 2015.
- [3] Jianjia Fei and Robert Joynt. Numerical computations of separability probabilities. *Rep. Math. Phys.*, 78(2):177–182, 2016.
- [4] Karol Życzkowski, Peres Horodecki, Anna Sanpera, and Maciej Lewenstein. Volume of the set of separable states. *Phys. Rev. A*, 58:883–892, Aug 1998.
- [5] Attila Lovas and Attila Andai. Invariance of separability probability over reduced states in 4×4 bipartite systems. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 50(29):295303, 2017.
- [6] Dénes Petz. Monotone metrics on matrix spaces. *Linear Algebra Appl.*, 244:81–96, 1996.
- [7] Dénes Petz and Csaba Sudár. Geometries of quantum states. *J. Math. Phys.*, 37(6):2662–2673, 1996.
- [8] Paul B. Slater. A concise formula for generalized two-qubit Hilbert–Schmidt separability probabilities. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 46(44):445302, 2013.
- [9] Paul B. Slater and Charles F. Dunkl. Generalized two-qubit whole and half Hilbert–Schmidt separability probabilities. *J. Geom. Phys.*, 90:42–54, 2015.