Sätze über Dichtematrizen

Von A. UHLMANN, Leipzig

Im folgenden betrachten wir Matrizen mit fester Zeilen- und Spaltenzahl n. Eine Matrix A heißt *Dichtematrix* genau dann, wenn sie positiv semidefinit ist und die Spur 1 besitzt:

$$A \geqslant 0 \quad \text{und} \quad \mathrm{Tr.}\, A = 1. \tag{1}$$

Die Gesamtheit aller Dichtematrizen wollen wir den *Zustandsraum* unseres physikalischen Systems nennen und mit Z bezeichnen

$$Z = \{A : A \text{ ist Dichtematrix}\}. \tag{2}$$

Sind $A_1, \ldots, A_m$ irgendwelche Dichtematrizen und sind $p_1, \ldots, p_m$ nichtnegative reelle Zahlen mit Summe 1

$$p_j \geqslant 0 \quad \text{und} \quad p_1 + p_2 + \cdots + p_m = 1, \tag{3}$$

so ist auch

$$A = p_1 A_1 + p_2 A_2 + \cdots + p_m A_m \tag{4}$$

eine Dichtematrix. Aus diesem Grund nennen wir die Menge Z *konvex*. Eine Linearkombination (4), deren Koeffizienten die Bedingung (3) erfüllen, heißt *konvexe Linearkombination*. In Anbetracht ihrer physikalischen Interpretation benützen wir auch folgende Terminologie: Wir sagen, die Dichtematrix A sei eine *Mischung* der Dichtematrizen A_j mit *Gewichten* p_j; denn A repräsentiert einen Zustand unseres physikalischen Systems, der als eine Mischung der durch die A_j gegebenen Zustände interpretiert werden kann.

Das Ziel der folgenden Untersuchung ist es, die „Gemischtheit" einer Dichtematrix zu bewerten. Zu einer sinnvollen Definition kommt man, wenn man zwei unitär äquivalente Dichtematrizen als „gleich stark gemischt" ansieht.

Definition: Sind A und B zwei Dichtematrizen, so schreiben wir $A \succ B$ und sagen A sei *gemischter* oder *chaotischer als B* genau dann, wenn A als Mischung von zu B unitär äquivalenten Dichtematrizen aufgefaßt werden kann.

A heißt somit gemischter bzw. chaotischer als B, wenn es unitäre Matrizen $U_1, \ldots, U_m$ und Zahlen p_j, die der Bedingung (3) genügen, so gibt, daß

$$A = p_1 U_1^{-1} B U_1 + \cdots + p_m U_m^{-1} B U_m \tag{5}$$

gilt.

Satz 1: Die Relation „gemischter als“ ist eine Halbordnung der Klassen unitär äquivalenter Dichtematrizen:

$$\text{Aus } A \succ B, \quad B \succ C \quad \text{folgt} \quad A \succ C. \tag{6}$$

Aus $A \succ B$ und $B \succ A$ folgt die unitäre Äquivalenz von A und B.

Der Beweis von (6) ist unter Benutzung von Darstellungen der Art (5) leicht zu erbringen. Die letzte Aussage des Satzes ist etwas komplizierter und wird später bewiesen.

Satz 2: Sei B eine Dichtematrix. Die Menge aller Dichtematrizen A mit $A \succ B$ ist kompakt.
Beweis: Sei N die Menge aller zu B unitär äquivalenten Dichtematrizen. $A \succ B$ genau dann, wenn A in der konvexen Hülle $\{N\}$ von N liegt. N ist aber eine kompakte Menge, und nach einem Satz von *Caratheodory* [1] ist für einen endlich-dimensionalen Raum dann auch $\{N\}$ kompakt.
Folgerung: Sei G eine kompakte Gruppe unitärer Matrizen. Sei A^G durch

$$(x, A^G y) = \int_G (Ux, AUy)\, \mathrm{d}U \tag{7}$$

definiert mit dem

Haarschen Maß dU von G [5].

Dann ist

$$A^G \succ A. \tag{8}$$

Folgerung: Sei A eine Dichtematrix, E die Einheitsmatrix und P ein eindimensionaler Projektionsoperator.
Dann ist

$$\frac{1}{n} E \succ A \succ P. \tag{9}$$

Die erste Folgerung resultiert direkt aus der Tatsache, daß A^G durch konvexe Linearkombinationen der zu A unitär äquivalenten Matrizen approximiert werden kann. Die zweite Folgerung ergibt sich so:
Ist G die Gruppe aller unitären Matrizen, so ist A^G ein Vielfaches der Einheit, da es mit allen Elementen von G vertauschbar ist. A^G ist ferner eine Dichtematrix und somit gleich $(1/n)E$. Andererseits ist jede Dichtematrix A konvexe Linearkombination von eindimensionalen Projektoren, die ihrerseits alle zu P unitär äquivalent sind. Hierzu brauchen wir nur die Spektralzerlegung von A zu betrachten.

Satz 3: Seien $a_1 \geqslant \cdots \geqslant a_m$ bzw. $b_1 \geqslant \cdots \geqslant b_m$ die Eigenwerte von A bzw. B. Genau dann gilt $A \succ B$, wenn für jedes j mit $1 \geqslant j \geqslant n$ die Ungleichung

$$\sum_{i=1}^{j} a_i \leqslant \sum_{i=1}^{j} b_i \tag{10}$$

gilt.

Bemerkung 1: Aus Satz 3 folgt die noch zu beweisende Aussage von Satz 1; denn ist $A \succ B$ und $B \succ A$, so sind nach obigen die Eigenwerte von A und B gleich und beide Matrizen unitär äquivalent.
Bemerkung 2: In (10) steht für $j = n$ das Gleichheitszeichen.
Bemerkung 3: Es ist bekannt [1], [2], daß (10) dann und nur dann bei Voraussetzung der Ordnung der a_i und b_j nach ihrer Größe gilt, wenn eine bistochastische Matrix t_{ik} mit

$$a_i = \sum_j t_{ij} b_j \quad \text{alle} \quad i \tag{11}$$

existiert. Eine Matrix heißt *bistochastisch*, wenn gilt

$$t_{ik} \geqslant 0, \quad \sum_i t_{ik} = \sum_k t_{ik} = 1. \tag{12}$$

Beweis: a) Die Bedingung (10) ist hinlänglich: Hierzu gehen wir von der Bemerkung 3 und der Darstellung (11) aus. Nach einem Satz von *Birkhoff* [1] ist jede bistochastische Matrix eine konvexe Linearkombination von Permutationsmatrizen, d.h. von Matrizen, die lediglich die Komponenten des Vektors $(b_1, \dots, b_n)$ vertauschen:

$$t_{ik} = \sum_j p_j t_{ik}(j), \quad t_{rs}(j) \text{ Permutation}. \tag{13}$$

Da $A \succ B$ eine Relation zwischen Äquivalenzklassen ist, können wir die Vertauschbarkeit von A und B voraussetzen und ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, daß beide in Diagonalform vorliegen. Die Permutation $t_{rs}(j)$ der Eigenwerte $(b_1, \dots, b_n)$ führt auf eine zu B unitär äquivalente Diagonalmatrix B_j, und somit ist $B = p_1 B_1 + \cdots + p_s B_s$ mit zu B unitär äquivalenten Matrizen B_j. Daher folgt aus (10), daß A gemischter ist als B.
Wir kommen nun zum Beweis b) der Notwendigkeit. Nehmen wir an, es liege die Darstellung (5) vor. Seien $x_1, \dots, x_n$ ein orthonormales Eigenvektorsystem zu den Eigenwerten $a_1, \dots, a_n$ von A. Dann ist

$$\sum_{i=1}^{j} a_i = \sum_{i=1}^{j} (x_i, Ax_i) = \sum_{k=1}^{n} p_k \sum_{i=1}^{j} (U_k x_i, BU_k x_i). \tag{14}$$

Nach einem Satz von *Ky Fan* [3] ist aber für ein beliebiges Orthonormalsystem $y_1, \dots, y_n$

$$\sum_{i=1}^{j} b_i \geqslant \sum_{k=1}^{j} (y_k, By_k), \tag{15}$$

so daß unter Beachtung von (3) die Ungleichung (10) folgt. Damit ist Satz 3 bewiesen.

Ohne Beweis seien hier noch zwei Beispiele für die Relation „gemischter als" angegeben:

Beispiel 1: Sei H eine hermitische Matrix (Hamiltonoperator) und $\beta k T = 1$. Wir betrachten die Dichtematrizen

$$A(T) = \exp(-H\beta)/\mathrm{Tr.}\exp(-H\beta). \tag{16}$$

Ist entweder $T_2 < T_1 < 0$ oder $0 < T_1 < T_2$, so ist

$$A(T_1) \prec A(T_2). \tag{17}$$

Beispiel 2: Ist A eine Dichtematrix und setzen wir alle nicht in der Hauptdiagonale von A stehenden Matrixelemente gleich Null, so entsteht wieder eine Dichtematrix A'. Es gilt

$$A \prec A'. \tag{18}$$

Eine wichtige Anwendung der eingeführten Begriffsbildungen betrifft die konkaven Funktionen auf dem Zustandsraum Z, zu denen auch die *Entropie* gehört. Eine reellwertige Funktion $f = f(A)$ auf der Menge der Dichtematrizen heißt konkav, wenn aus einer Mischung (4) mit Nebenbedingung (3) stets

$$f(A) \geqslant p_1 f(A_1) + \cdots + p_m f(A_m) \tag{19}$$

folgt. Eine solche konkave Funktion ist ebenfalls eine Bewertung der Mischungsverhältnisse von Dichtematrizen (Zuständen); denn ihr Wert für eine Mischung ist nach Definition nie kleiner als das mit den entsprechenden Gewichten genommene Mittel der Funktionswerte der an der Mischung beteiligten Dichtematrizen. Besonders wichtig sind dabei die *streng konkaven* Funktionen, bei denen $p_j \neq 0$, vorausgesetzt, daß das Gleichheitszeichen in (18) dann und nur dann gilt, wenn $A_1 = A_2 = \cdots = A_m = A$ ist.

Sei nämlich f eine streng konkave und stetige Funktion der Dichtematrizen, ist dann K eine abgeschlossene konvexe Teilmenge von Dichtematrizen, so gibt es genau eine Matrix B in K so, daß $f(B) \geqslant f(A)$ für alle A aus K gilt. Diese durch f und K eindeutig bestimmte Matrix heißt das *f-Gleichgewicht von K.*

Der Beweis dieser Behauptung ist einfach: Da K abgeschlossen und somit als Menge von Dichtematrizen kompakt ist, nimmt f auf K das Maximum an. Wird das Maximum für B und C angenommen und wäre $B \neq C$, so folgte für $D = \frac{1}{2}(B + C)$ offenbar $f(D) > \frac{1}{2} f(B) + \frac{1}{2} f(C) = f(B)$, was den Voraussetzungen widerspricht.

Aus Satz 3 und Bemerkung 2 folgt mit Hilfe von (19) nachstehendes Resultat:

Satz 4: Ist f auf Z konkav und unitär invariant, d.h.

$$f(A) = f(U^{-1}AU)$$

für alle A und unitären U, so folgt aus $A \succ B$ stets

$$f(A) \geqslant f(B).$$

Eine große Klasse solcher konkaver und unitär invarianten Funktionen [4], [6] entsteht wie folgt: Ist $r(s)$ im Intervall $0 \leq s \leq 1$ streng konkav, so ist die Funktion

$$\mathrm{Tr.}\, r(A) = r(a_1) + \cdots + r(a_n) \tag{20}$$

auf Z streng konkav. Die a_j bezeichnen dabei sämtliche Eigenwerte der Matrix A entsprechend ihrer Vielfachheit. Setzen wir in (20) für r die Funktion $-x \ln x$ ein, so entsteht die mit $h(A)$ bezeichnete *Entropie* der Dichtematrix A.

Beispiel [7]: Seien $F_1, \ldots, F_j$ hermitische Matrizen, und K sei die Menge aller Dichtematrizen für die mit vorgegebenen Zahlen $b_1, \ldots, b_j$ gilt

$$\mathrm{Tr.}\, AF_i = b_i, \quad i = 1, \ldots, j. \tag{21}$$

Ist K nicht leer, so ist das h-Gleichgewicht von K diejenige Dichtematrix aus K, die die Form

$$\exp\,(\widetilde{bE} + \widetilde{b_1 F_1} + \cdots + \widetilde{b_j F_j}) \tag{22}$$

besitzt.

Die oben definierte, von *Gibbs*, von *Neumann* und anderen stammende Entropiedefinition hat daher die Eigenschaft, für h-Gleichgewichtszustände das verallgemeinerte Boltzmannsche Verteilungsgesetz zu liefern. Die angegebenen Kriterien für die Relation „gemischter als" geben mit Hilfe der Konstruktion (20) wegen Satz 4 eine Fülle einfacher Entropieabschätzungen und andere, für die statistische Physik wichtige Ungleichungen.

Literatur

[1] *Glasman, I. M.*, und *Y. I. Gubitsch*, Endlichdimensionale lineare Analysis, Moskau 1969 (russ.).
[2] *Hardy, G. H.*, *I. E. Littlewood*, und *G. Polya*, Inequalities, Cambridge 1952.
[3] *Ky Fan*, Proc. Nat. Acad. Sci. USA, *37*, 760, 1951.
[4] *Miracle-Sole, S.*, and *B. W. Robinson*, Comm. Math. Phys., *14*, 235, 1969.
[5] *Pontrjagin, L. S.*, Topologische Gruppen, Leipzig 1957.
[6] *Uhlmann, A.*, Rep. Math. Phys., *1*, 147, 1970.
[7] *Zubarev, D. N.*, und *V. P. Kalshnikov*, Teop. Mam. Физ., *1*, 137, 1969.

Anschrift des Verfassers:
Prof. Dr. A. Uhlmann,
Sektion Physik, Karl-Marx-Universität,
701 Leipzig, Linnéstraße 5