

Endlich-dimensionale Dichtematrizen II

Von A. UHLMANN, Leipzig

Vorbemerkungen

Im folgenden werden wir uns auf den ersten Teil dieser Arbeit [39] beziehen, in dem auch die Literaturzitate [1] bis [21] zu finden sind. Die Numerierung der Sätze und Definitionen schließt sich fortlaufend an den Teil I an. Nur einige wichtige Begriffe und Sätze seien kurz wiederholt:

Über einem *endlich*-dimensionalen Hilbert-Raum betrachten wir die „Zustandsraum“ genannte Gesamtheit Ω aller Dichtematrizen

$$\Omega = \{\varrho : \varrho \geq 0, \text{Tr. } \varrho = 1\}.$$

Er ist eine konvexe Menge im linearen Raum aller hermiteschen Matrizen. In Ω führen wir gewisse Halbordnungen ein, die auf die Menge aller Matrizen ausdehnbar sind. Sei G eine kompakte Gruppe unitärer Matrizen. Wir nennen die Matrix A „ G -gemischter als B “ und schreiben

$$A \succ^G B$$

genau dann, wenn A eine konvexe Linearkombination

$$A = \sum p_j U_j^{-1} B U_j$$

mit $U_j \in G$ ist (Definition 3.4.). Die Relation „ G -gemischter als“ ist eine Halbordnung der Äquivalenzklassen

$$\{U^{-1} B U, U \in G\}$$

(Satz 3.7.). Die Menge

$$\{A : A \succ^G B \text{ und } U A = A U \text{ alle } U \in G\}$$

besteht nur aus einem Element, das B^G genannt wird (Satz 3.8.) und das mit dem invarianten Wahrscheinlichkeitsmaß $d_G U$ von G auch

$$B^G = \int_G U^{-1} B U d_G U$$

geschrieben werden kann (Formel 3.50.).

Ist G die Menge *aller* unitären Matrizen, so schreiben wir einfach \succ für \succ^G und sagen „gemischter“ („chaotischer“) anstelle von „ G -gemischter“.
Sei für hermitisches A

$e_m^+(A)$ = Summe der m größten Eigenwerte von A ,

dann gilt der Satz 3.2., den wir wie folgt formulieren:

Seien A und B zwei hermitische Matrizen. Genau dann ist

$$A \succ B,$$

wenn

$$\text{Tr. } A = \text{Tr. } B$$

und

$$e_m^+(A) \leq e_m^+(B) \quad \text{alle } m$$

gilt.

Diese notwendige und hinreichende Bedingung ist mit der Existenz einer bistochastischen Matrix t_{ij} äquivalent, die die Eigenwerte $\{b_j\}$ von B wie folgt in die Eigenwerte $\{a_i\}$ von A transformiert:

$$a_j = \sum_i t_{ji} b_i.$$

Aus dem Beweis von Satz 3.2. aus [39] ist zu sehen:

Gilt $A \succ B$ mit hermitischem B , so gibt es unitäre Matrizen U und U_j derart, daß

$$U^{-1}AU = \sum p_j U_j^{-1} B U_j, \quad p_j \geq 0,$$

gilt, mit

$$[U_j^{-1} B U_j, U_i^{-1} B U_i] = 0, \quad \text{alle } i, j.$$

4. Konvexe und konkave Funktionale

Konvexe bzw. konkave Funktionale sind ein anderes Mittel, die Gemischtheit von Zuständen zu bewerten. Wie gezeigt wird, ist die Betrachtung bestimmter Klassen dieser Funktionale eng mit den Halbordnungen vom Typ \succ^G verbunden. Zur betrachteten Klasse von Funktionalen gehören aber auch solche Zustandsgrößen wie die Entropie und der Logarithmus der Zustandssumme.

Im Abschnitt 4.1. wird der Begriff konvex bzw. konkav in elementarer Weise eingeführt. Danach werden im Abschnitt 4.2. die in der statistischen Physik häufig auftretenden Funktionale der Gestalt $\text{Tr. } f(A)$ und ihre Verallgemeinerung behandelt. Diese Funktionen sind sämtlich unitär invariant, d. h., sie hängen nur von den Eigenwerten von A ab. Mit den in der Vorbemerkung zitierten Sätzen aus [39] können alle unitär invarianten konvexen Funktionale durch Zurückführung auf den kommutativen Fall angegeben werden (Abschnitt 4.3.). Schließlich werden im letzten Abschnitt die Beziehungen zum Begriff „ G -gemischter“ hergestellt. Leider kann die hierzu gehörende

Klasse der G -invarianten konvexen Funktionale noch nicht auf einen ähnlich einfachen Fall zurückgeführt werden. Hier gibt es daher noch viele offene Fragen (z.B. solche, die mit Verallgemeinerungen der „schiefen Information“ von *Wigner* und *Yanase* [42] zusammenhängen).

4.1. Konkave und konvexe Funktionale

Einführungen in das Gebiet der konvexen Funktionale geben [1, 18, 35]. Eigenschaften der in Abschnitt 4.3. behandelten Funktionalen mit z. T. anderen Beweisen finden sich in [13, 18, 19].

In einem reellen linearen Raum sei eine konvexe Menge \mathfrak{R} gegeben. $f(x)$, $x \in \mathfrak{R}$ sei ein auf \mathfrak{R} definiertes reellwertiges Funktional.

Definition 4.1.

Ein auf einer konvexen Menge \mathfrak{R} erklärtes reellwertiges Funktional

$$f: x \rightarrow f(x), \quad x \in \mathfrak{R}, \quad (4.1)$$

heißt konvex, wenn für beliebige Elemente x_1, \dots, x_m aus \mathfrak{R} und beliebige konvexe Linearkombination

$$x = \sum_{i=1}^m p_i x_i, \quad \text{konvexe Summe,} \quad (4.2)$$

stets

$$f(x) \leq \sum_{i=1}^m p_i f(x_i) \quad (4.3)$$

gilt. f heißt konkav, wenn aus (4.2) stets

$$f(x) \geq \sum_{i=1}^m p_i f(x_i) \quad (4.4)$$

folgt.

Ein konvexes (konkaves) Funktional f heißt streng konkav (streng konvex), wenn das Gleichheitszeichen in (4.3) bzw. (4.4) nur eintritt, falls gilt

$$x_j = x \quad \text{alle } j \quad \text{mit } p_j \neq 0. \quad (4.5)$$

Bemerkung 1: Für ein konvexes Funktional ist der „Wert“ $+\infty$ und für ein konkaves Funktional ist der „Wert“ $-\infty$ zugelassen. Streng konvexe (konkave) Funktionale werden stets als endlich vorausgesetzt.

Bemerkung 2: Ist f konvex, so $-f$ konkav. Ist f konkav, so $-f$ konvex. Aus diesem Grunde langt es, sich entweder auf konvexe oder auf konkave Funktionen zu beschränken. Von beiden Möglichkeiten wird gelegentlich Gebrauch gemacht.

Bemerkung 3: Ein konkaves (konvexes) Funktional bewertet eine Mischung von Elementen höher (niedriger) als die mit den entsprechenden Gewichten gemittelten Funktionswerte dieser Elemente. Ein konkaves Funktional ist daher ein relatives Maß für den Grad der Gemischtheit.

Für zwei konkave Funktionale f_1 und f_2 gibt es im allgemeinen Elementpaare x, y so, daß sowohl $f_1(x) > f_2(x)$ als auch $f_1(y) < f_2(y)$ gilt.

Daher bietet jedes konkave Funktional f nur eine relative, d. h., von f abhängende Beurteilung der Mischungsverhältnisse.

Sind f_1, \dots, f_m konvexe (konkave) Funktionale, so ist

$$\alpha_1 f_1 + \dots + \alpha_m f_m, \quad \alpha_j \geq 0$$

stets auch konvex (konkav). Weiter gilt

Lemma 4.1.

Sei \mathfrak{F} eine Menge konvexer Funktionale. Dann sind

$$f(x) = \sup f_\alpha(x), \quad f_\alpha \in \mathfrak{F}, \quad (4.6)$$

und

$$\tilde{f}(x) = \overline{\lim} f_\alpha(x), \quad f_\alpha \in \mathfrak{F}, \quad (4.7)$$

ebenfalls konvex.

Ist \mathfrak{F} eine Menge konkaver Funktionale, so sind

$$\inf f_\alpha(x), \quad \underline{\lim} f_\alpha(x); \quad f_\alpha \in \mathfrak{F}, \quad (4.8)$$

ebenfalls konkav.

Die nicht sehr komplizierten Beweise können in [35] nachgelesen werden. Ist ein Funktional auf einer konvexen Menge konkav oder konvex, so auch auf jeder in ihr enthaltenen konvexen Teilmenge.

Sei weiter $l(x)$ ein lineares Funktional, für das

$$\alpha \leq l(x) \leq \beta \quad \text{alle } x \in \mathfrak{R}$$

gilt. Ist dann die auf dem Intervall $[\alpha, \beta]$ der Zahlengeraden erklärte Funktion $r(s)$ konkav bzw. konvex, so ist

$$r(l(x))$$

auf \mathfrak{R} konkav bzw. konvex.

Diesen einfachen Zusammenhang werden wir im nächsten Abschnitt benutzen, um konvexe Funktionale zu konstruieren, die auf konvexen Mengen hermitescher Matrizen (und insbesondere auf dem Zustandsraum) erklärt sind.

Wie im Abschnitt 5. etwas ausführlicher erläutert wird, ist eine Funktion in einem Intervall genau dann konvex, wenn ihre zweite Ableitung niemals negativ wird. Dieses Kriterium liefert uns rasch Beispiele konvexer Funktionen auf Intervallen der Zahlengeraden.

Beispiele konvexer Funktionen:

Intervall	Funktion
$0 < s < \infty$	$s^k, k \leq 0$
	$s^k, 1 \leq k$

$$\begin{array}{ll}
-s^k, & 0 \leq k \leq 1 \\
-\ln s & \\
s \ln s & \\
-\infty < s < +\infty & \exp(as)
\end{array}$$

4.2. Konvexe Funktionale vom Typ $\text{Tr. } r(A)$

Die im folgenden betrachteten Funktionale sind natürlicherweise auf einer größeren, die Menge der Dichtematrizen umfassenden Menge hermitescher Matrizen definiert und dort konkav bzw. konvex.

Lemma 4.2.

Seien $\alpha < \beta$ reelle Zahlen. Die Menge

$$[\alpha, \beta]_n$$

aller hermiteschen $n \times n$ -Matrizen, deren Eigenwerte im Intervall $[\alpha, \beta]$ liegen, ist konvex.

Denn nach Definition ist

$$[\alpha, \beta]_n = \{H = H^* : \alpha E \leq H \leq \beta E\}, \quad (4.9)$$

und daher ist für alle Vektoren ξ

$$\alpha (\xi, \xi) \leq (\xi, H\xi) \leq \beta (\xi, \xi) \quad (4.10)$$

und $[\alpha, \beta]_n$ ist der Durchschnitt der konvexen Mengen

$$\{H = H^* : \alpha \leq (\xi, H\xi) \leq \beta, (\xi, \xi) = 1\}.$$

Das beweist die Behauptung. \square

Definition 4.2.

Sei A hermitisch und seien

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \quad (4.11)$$

sämtliche Eigenwerte von A . Wir setzen

$$e_m^+(A) = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_m, \quad (4.12)$$

$$e_m^-(A) = \lambda_n + \lambda_{n-1} + \dots + \lambda_{n-m+1}. \quad (4.13)$$

Es gilt daher

$$e_m^+(A) + e_{n-m}^-(A) = \text{Tr. } A, \quad e_m^+(-A) = -e_m^-(A). \quad (4.14)$$

Insbesondere ist das im Satz 3.2. (siehe Vorbemerkung) auftretende Ungleichungssystem

$$e_m^+(A) \leq e_m^+(B) \quad \text{alle } m \quad (4.15a)$$

mit

$$e_m^-(A) \geq e_m^-(B), \quad 1 \leq m \leq n \quad (4.15b)$$

gleichbedeutend.

Nun erinnern wir uns noch der Definition von $r(A)$, wenn A hermitisch und r eine Funktion der reellen Veränderlichen ρ ist.

Definition 4.3.

Ist $A \in [\alpha, \beta]_n$ und ist $r(s)$ eine auf dem Intervall $[\alpha, \beta]$ erklärte Funktion, so ist

$$r(A) = \sum r(\lambda_i) \pi_i \quad (4.16)$$

falls

$$A = \sum \lambda_i \pi_i, \quad (4.17)$$

eine Spektralzerlegung von A ist.

Lemma 4.3.

Sei $A \in [\alpha, \beta]_n$ und $r(s)$ auf $[\alpha, \beta]$ definiert. Für jeden Vektor ξ mit

$$(\xi, \xi) = 1 \quad (4.18a)$$

gilt

$$(\xi, r(A) \xi) \leq r((\xi, A\xi)) \quad \text{falls } r \text{ konkav,} \quad (4.18b)$$

$$(\xi, r(A) \xi) \geq r((\xi, A\xi)) \quad \text{falls } r \text{ konvex} \quad (4.18c)$$

ist. Ist r streng konkav oder konvex, so gilt in der entsprechenden Ungleichung (4.18b) bzw. (4.18c) das Gleichheitszeichen genau dann, wenn ξ ein Eigenvektor von A ist.

Beweis: Sei r konkav und sei

$$\xi = \sum \alpha_i \xi_i \quad \text{mit} \quad A\xi_i = \lambda_i \xi_i, \quad (\xi_i, \xi_i) = 1.$$

Wegen (4.18a) gilt $\sum |\alpha_i|^2 = 1$.

Es ist

$$(\xi, r(A) \xi) = \sum r(\lambda_i) |\alpha_i|^2$$

$$r((\xi, A\xi)) = r\left(\sum \lambda_i |\alpha_i|^2\right).$$

Da r konkav ist, gilt (4.18b). Sei nun r streng konkav und gelte in (4.18b) das Gleichheitszeichen. Wir können $\alpha_1 \neq 0$ voraussetzen. Ist dann $\alpha_j \neq 0$, so muß $(\xi, A\xi) = \lambda_1 = \lambda_j$ und daher ξ eine Linearkombination von Vektoren sein, die sämtlich Eigenvektoren von A mit Eigenwert λ_1 sind. Daher ist $A\xi = \lambda_1 \xi$. Die Umkehrung ist trivial. Der Übergang $r \rightarrow -r$ ergibt den Beweis für konvexe Funktionen (siehe auch [40]). | = |

Mit Hilfe des eben bewiesenen Lemmas kommen wir nun zur Bestätigung des folgenden Sachverhaltes:

Satz 4.1.

Sei $r(s)$ eine im Intervall $[\alpha, \beta]$ erklärte konvexe Funktion. Das Funktional

$$e_m^+(r(A)), \quad A \in [\alpha, \beta]_n \quad (4.19a)$$

ist auf $[\alpha, \beta]_n$ konvex.

Ist $r(s)$ konkav, so ist das Funktional

$$e_m^-(r(A)) \quad (4.19b)$$

konkav.

Beweis: Wegen (4.14) können wir uns auf konvexes $r(s)$ beschränken. Dann ist für $(\xi, \xi) = 1$ das Funktional $r((\xi, A\xi))$ konvex (siehe Bemerkung am Ende des Abschnittes 4.1.). Folglich ist nach Lemma 4.1.

$$f(A) = \sup \sum_{j=1}^m r((\xi_j, A\xi_j)) \quad (4.20a)$$

konvex, wobei das Supremum über alle Orthogonalsysteme ξ_1, \dots, ξ_m der „Länge“ m läuft. Wegen Lemma 4.4. ist

$$f(A) \leq \sup \sum_{j=1}^m (\xi_j, r(A) \xi_j), \quad (4.20b)$$

wobei das Supremum wiederum alle Orthogonalsysteme der Länge m durchläuft. Nach dem Satz von *Ky Fan* (Lemma 3.4.) ist dieses Supremum aber gleich der Summe der m größten Eigenwerte von $r(A)$. Setzt man aber in (4.20) ein Orthonormalsystem ein, das aus den Eigenvektoren von A der m größten Eigenwerte von $r(A)$ besteht, so sieht man, daß auch

$$f(A) \geq e_m^+(r(A))$$

gelten muß. Also ist (4.19) ein konkaves Funktional. $|\equiv|$

Der Beweis von Satz 4.1., insbesondere Formel (4.20a), zeigt noch folgendes:

Satz 4.2.

Ist $r(s)$ im Intervall $[\alpha, \beta]$ konvex und ist

$$\xi_1, \dots, \xi_m \quad \text{mit} \quad (\xi_i, \xi_k) = \delta_{ik} \quad (4.21a)$$

ein beliebiges Orthonormalsystem der Länge m , so gilt für $A \in [\alpha, \beta]_n$

$$e_m^+(A) \geq \sum_{k=1}^m r(\alpha_k) \quad \text{mit} \quad \alpha_k = (\xi_k, A\xi_k). \quad (4.21b)$$

Das Gleichheitszeichen tritt für streng konvexes r dann und nur dann ein, wenn ξ_1, \dots, ξ_m Eigenvektoren von A zu den m größten Eigenwerten von $r(A)$ sind.

Sei nämlich $r(\alpha_1) \geq r(\alpha_2) \geq \dots \geq r(\alpha_m)$. Es ist $r(\alpha_j) < (\xi_j, r(A) \xi_j)$, wenn nicht ξ_j Eigenvektor von A ist. Steht also das Gleichheitszeichen, so müssen die $(\xi_j, r(A) \xi_j)$ die m größten Eigenwerte von $r(A)$ sein.

Für $m = n$ erhalten wir aus den Sätzen 4.1. und 4.2. einige allgemein bekannte Spezialfälle.

Satz von J. von Neumann

Ist $r(s)$ in $[\alpha, \beta]$ konkav, so ist auch das auf $[\alpha, \beta]_n$ erklärte Funktional

$$\text{Tr. } r(A) \quad (4.22)$$

konkav.

J. von Neumann zeigte ferner, daß (4.22) streng konkav ist für streng konkaves $r(s)$. Diese Tatsache ist ein Spezialfall des noch zu beweisenden Satzes 4.3.

Ungleichung von Peierls

Für auf $[\alpha, \beta]$ konvexes $r(s)$ gilt für ein beliebiges vollständiges Orthogonalsystem ξ_1, \dots, ξ_n

$$\text{Tr. } r(A) \geq \sum_{i=1}^n r((\xi_i, A\xi_i)) \quad (4.23a)$$

und für streng konkaves r tritt Gleichheit in (4.23) nur für vollständige Systeme von Eigenvektoren von A ein.

Hieraus folgt die Ungleichung von *Peierls* im engeren Sinne:

Da $\exp s$ konvex auf der gesamten Zahlengeraden ist, gilt für beliebiges hermitesches A

$$\text{Tr. } e^A \geq \sum_{i=1}^n \exp\{(\xi_i, A\xi_i)\}. \quad (4.23b)$$

Die Summe der m größten Eigenwerte

Da die Funktion $r(s) = s$ linear und daher auf der ganzen Zahlengeraden trivialerweise konvex ist, ist

$$e_m^+(A), \quad 1 \leq m \leq n \quad \text{konvex für alle } A = A^*.$$

Da außerdem

$$e_m^+(\lambda A) = \lambda e_m^+(A), \quad \lambda \geq 0$$

gilt, folgt aus der Konvexität auch

$$e_m^+(A + B) \leq e_m^+(A) + e_m^+(B) \quad (4.24a)$$

(Subadditivität). Die entsprechende Aussage für die Summe der m kleinsten Eigenwerte ist

$$e_m^-(A + B) \geq e_m^-(A) + e_m^-(B). \quad (4.24b)$$

Ist ferner ξ_1, \dots, ξ_n ein beliebiges Orthonormalsystem und ist mit positiven λ_j auch $\sum \lambda_j \leq m, 1 \geq \lambda_j$, so ist

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i (\xi_i, A\xi_i) \leq \sum_{i=1}^m (\xi_i, A\xi_i), \quad (4.24c)$$

falls

$$(\xi_1, A\xi_1) \geq (\xi_2, A\xi_2) \geq \dots,$$

und die Gleichheit tritt für

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_m = 1, \lambda_{m+j} = 0 \quad \text{für } j > 0$$

ein. Sind π_j die Projektoren auf die Vektoren ξ_j und setzen wir $B = \lambda_1\pi_1 + \lambda_2\pi_2 + \dots$, so kann die linke Seite von (4.24c) als $\text{Tr. } BA$ geschrieben werden. Diese einfache Abschätzung führt zu

$$e_m^+(A) = \sup_B \text{Tr. } AB \quad \text{mit } B \in [0, 1]_n, \text{Tr. } B \leq m. \quad (4.25)$$

Satz 4.3.

Ist $r(s)$ in $[\alpha, \beta]$ streng konvex und gilt für eine konvexe Linearkombination

$$A = \sum p_j A_j, p_j > 0, A_j \in [\alpha, \beta]_n \quad (4.26a)$$

die Gleichung

$$f_m(A) = \sum p_j f_m(A_j) \quad (4.26b)$$

mit

$$f_m(A) = e_m^+(r(A)), \quad (4.26c)$$

so gilt:

1. Es gibt ein Orthonormalsystem der Länge m mit

$$A\xi_i = A_j\xi_i = \mu_i\xi_i \quad \text{alle } j \text{ und } 1 \leq i \leq m.$$

2. Ist $(\xi, \xi) = 1$ und $(\xi_k, \xi) = 0$ mit $1 \leq k \leq m$, so ist für $1 \leq i \leq m$ und alle j

$$r(\mu_i) \geq (\xi, r(A)\xi),$$

$$r(\mu_i) \geq (\xi, r(A_j)\xi).$$

Beweis: Seien $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots$ die Eigenwerte von $r(A)$ und sei ξ_1, \dots, ξ_m ein Orthonormalsystem von A , für das $\lambda_j = (\xi_j, r(A)\xi_j)$ gilt. Dann ist mit (4.26c)

$$f_m(A) = \sum_{i=1}^m r\left(\left(\xi_i, \sum_j p_j A_j \xi_i\right)\right).$$

Damit nun für $1 \leq i \leq m$ in

$$r\left(\left(\xi_i, \sum_j p_j A_j \xi_i\right)\right) \leq \sum_j p_j r\left(\left(\xi_i, A_j \xi_i\right)\right) \quad (4.27a)$$

das Gleichheitszeichen gilt, muß

$$(\xi_i, A_1 \xi_i) = (\xi_i, A_2 \xi_i) = \dots \quad (4.27b)$$

sein. Wegen Lemma 4.3. gilt dann in

$$r\left(\left(\xi_i, \sum_j p_j A_j \xi_i\right)\right) \leq \sum_j p_j (\xi_i, r(A_j) \xi_i)$$

genau dann das Gleichheitszeichen, wenn

$$A_j \xi_i = \mu_{ji} \xi_i \quad (4.27c)$$

gilt. Aus (4.27c) und (4.27b) folgt $\mu_{1i} = \mu_{2i} = \dots$ und wegen (4.26a) ist

$$(A - A_j) \xi_i = 0 \quad \text{alle } j, 1 \leq i \leq m. \quad (4.27d)$$

Gilt daher (4.26b) nicht, so ist

$$f_m(A) < \sum_j p_j \sum_{i=1}^m (\xi_i, r(A_j) \xi_i) \leq \sum p_j e_m^+(r(A_j)).$$

Gilt aber (4.27c), so müssen unter den Eigenwerten $(\xi_i, r(A_i) \xi_i)$, $i = 1, \dots, m$ auch die m größten von $r(A_j)$ vorkommen. $|=|$

Folgerung (J. von Neumann):

Ist $r(s)$ streng konkav in $[\alpha, \beta]$, so ist $\text{Tr. } r(A)$ streng konkav in $[\alpha, \beta]_n$.

4.3. Unitär invariante konvexe Funktionale

Die bisher konstruierten konvexen und konkaven Funktionale haben sämtlich die Eigenschaft

$$f(A) = f(U^{-1}AU) \quad \text{für alle unitären } U.$$

Im folgenden wollen wir die Gesamtheit aller solcher konvexen (konkaven) Funktionale charakterisieren und dabei weitere wichtige Beispiele von physikalischer Bedeutung gewinnen. Ihre besondere Stellung liegt natürlich gerade in ihrem „maximal symmetrischen“ Verhalten, in ihrer Invarianz gegen sämtliche möglichen Symmetrien.

Definition 4.4.

Eine konvexe Menge \mathfrak{K} von Matrizen heiÙe unitär invariant, wenn sie mit einem Element A auch alle Matrizen der Form $U^{-1}AU$ mit unitärem U enthält. Ein auf \mathfrak{K} erklärtes Funktional heiÙt unitär invariant, wenn

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

für alle $A \in \mathfrak{K}$ und alle unitären U gilt.

Eine sehr einfache, aber wichtige Aussage ist

Lemma 4.4.

Ist f auf der unitär invarianten konvexen Menge \mathfrak{K} unitär invariant und konvex, so gilt für $A \succ B$ mit $B \in \mathfrak{K}$ stets $f(A) \leq f(B)$.

Es ist nämlich dann auch $A \in \mathfrak{R}$, und die fragliche Ungleichung folgt unmittelbar aus den entsprechenden Definitionen. $|\leq|$

Lemma 4.4. können wir auch leicht umkehren: Ist nämlich $f(A) \leq f(B)$ für ein Paar von Elementen A, B aus \mathfrak{R} für alle unitär invarianten konvexen Funktionen, so ist $A \succ B$. In der Tat, $e_m^+(\cdot)$ sind konvexe Funktionen, und daher gilt insbesondere $e_m^+(A) \leq e_m^+(B)$. Um $\text{Tr. } A \geq \text{Tr. } B$ auszuschließen, brauchen wir nur zu bemerken, daß $A \rightarrow -\text{Tr. } A$ eine konvexe Funktion trivialerweise ist.

Somit können wir sagen: $A \succ B$ genau dann für zwei Elemente aus \mathfrak{R} , wenn für alle auf \mathfrak{R} erklärten unitärinvarianten konvexen Funktionen f die Ungleichung $f(A) \leq f(B)$ besteht $|\leq|$.

Satz 4.4.

Sei f eine auf der unitär invarianten konvexen Menge \mathfrak{R} hermitescher Matrizen erklärte stetige Funktion. f ist genau dann konvex auf \mathfrak{R} , wenn für jedes Paar kommutierender Elemente

$$[A, B] = 0, A, B \in \mathfrak{R} \quad (4.28)$$

die Ungleichung

$$f\left(\frac{A+B}{2}\right) \leq \frac{1}{2}f(A) + \frac{1}{2}f(B) \quad (4.29)$$

gilt.

Beweis: Ist f konvex, so ist die Aussage trivial. Setzen wir daher (4.29) voraus. Wir zeigen zunächst: Ist $A \succ B$ mit $A, B \in \mathfrak{R}$ so gilt $f(A) \leq f(B)$. Hierzu wählen wir unitäre Matrizen U, U_j so, daß

$$UAU^{-1} = \sum p_j U_j B U_j^{-1} \quad \text{konvexe Summe} \quad (4.30)$$

mit untereinander vertauschbaren Matrizen

$$UAU^{-1}, U_j A U_j^{-1} \quad \text{alle } j \quad (4.31)$$

ist. Zu einem gemeinsamen Orthonormalsystem von Eigenvektoren dieser Matrizen betrachten wir die Menge \mathfrak{R}_0 aller D aus \mathfrak{R} , die dieses feste Orthonormalsystem als Eigenvektorsystem besitzen. Diese Menge \mathfrak{R}_0 ist konvex, und auf ihr ist f wegen der Stetigkeit von f und der durchgängigen Gültigkeit von (4.29) konvex („Ungleichung von Jensen“). Da die Matrizen (4.31) zu \mathfrak{R}_0 gehören und (4.30) gilt, folgt

$$f(A) = f(UAU^{-1}) \leq \sum p_j f(U_j B U_j^{-1}) = f(B). \quad (4.32)$$

Daher ist $f(A) \leq f(B)$ immer dann, wenn A gemischer ist als B . Nun betrachten wir zwei beliebige Matrizen aus \mathfrak{R} . Sei

$$\sum \lambda_i \pi_i = A_1 + A_2 \quad (4.33)$$

die Spektralzerlegung ihrer Summe. Es ist dann

$$A_1 + A_2 = A'_1 + A'_2 \quad (4.34)$$

mit

$$A'_j = \sum_i (\text{Tr. } A_j \pi_i) \pi_i \quad (4.35)$$

und

$$[A'_1, A'_2] = 0.$$

Also ist nach (4.29)

$$f\left(\frac{A_1 + A_2}{2}\right) = f\left(\frac{A'_1 + A'_2}{2}\right) \leq \frac{1}{2}f(A'_1) + \frac{1}{2}f(A'_2).$$

Nach Satz 3.5. bzw. 3.6. gilt aber nach Konstruktion

$$A'_j \succ A_j$$

und daher

$$f(A'_j) \leq f(A_j).$$

Somit gilt für alle $A_1, A_2 \in \mathfrak{K}$ die Ungleichung

$$f\left(\frac{A_1 + A_2}{2}\right) \leq \frac{1}{2}f(A_1) + \frac{1}{2}f(A_2),$$

und wegen der Stetigkeit von f ist diese Ungleichung mit (4.3) äquivalent (Ungleichung von Jensen, siehe Lemma 5.4.). $|=|$

Satz 4.4. erlaubt ein einfaches Konstruktionsverfahren für unitär invariante konvexe (bzw. konkave Funktionen), das wir nun beschreiben.

Lemma 4.5.

Sei \mathfrak{K}_0 eine abgeschlossene konvexe Menge des n -dimensionalen Zahlenraumes, die mit einem Vektor auch sämtliche durch Permutation seiner Komponenten entstehenden Vektoren enthält. Die Menge \mathfrak{K} aller hermiteschen $(n \times n)$ -Matrizen, deren n -Tupel von Eigenwerten in \mathfrak{K}_0 liegen, ist unitär invariant und konvex.

Beweis: Seien A_1, A_2 aus \mathfrak{K} . Angenommen, es gibt zwei Matrizen A'_1, A'_2 mit

$$A'_i \in \mathfrak{K}, [A'_1, A'_2] = 0, A_1 + A_2 = A'_1 + A'_2.$$

Dann ist offenbar $\frac{1}{2}(A_1 + A_2)$ in \mathfrak{K} ; denn der kommutative Fall ist durch die Voraussetzung der Konvexität von \mathfrak{K}_0 klar. Wir bestimmen nun A'_1, A'_2 wie im Beweis von Satz 4.4. durch die Gleichungen (4.33) bis (4.35) geschehen ist. Es muß daher nur noch gezeigt werden, daß aus $A \succ B$ und $B \in \mathfrak{K}$ stets $A \succ \mathfrak{K}$ folgt. Das ist wieder eine Aussage über die Eigenwerte.

Nach Voraussetzung ist der Eigenwertsvektor $\{a_i\}$ von A gemischer als der Eigenwertsvektor $\{b_j\}$ von B , und $\{b_j\}$ liegt in \mathfrak{K}_0 . Da nach Voraussetzung über \mathfrak{K}_0 auch alle permutierten Vektoren $\{b_{j_i}\}$ in \mathfrak{K}_0 liegen, folgt aus der Konvexität von \mathfrak{K}_0 , daß $\{a_i\}$ in \mathfrak{K}_0 liegen muß (Lemmata 3.2. und 3.3. bzw. kommutativer Spezialfall von Satz 3.2.). Also ist $A \in \mathfrak{K}$. $|=|$

Sei nun $\varphi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ eine auf \mathfrak{R}_0 erklärte konvexesymmetrische und stetige Funktion. Wir erklären

$$f(A) = \varphi(\lambda_1, \dots, \lambda_n), \{\lambda_j\} = \text{Eigenwerte von } A. \quad (4.36)$$

Dann ist f ein unitärinvariantes, auf \mathfrak{R} erklärtes konvexes Funktional. Die Unitärinvarianz ist trivial, die Konvexität folgt nach Satz 4.4. $|\cdot|$

Beispiele: Zur Auswertung dieser Konstruktion kann man bekannte konvexe Funktionen (siehe etwa [18, 19]) benutzen; z. B. ist auf der Menge der Vektoren

$$\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}, \lambda_j \geq 0$$

die Funktion

$$\left(\sum \lambda_i^s\right)^{1/s}$$

konvex oder konkav, je nachdem ob $s \geq 1$ oder $0 \leq s \leq 1$ ist.

Satz 4.4. sagt dann, daß

$$A \rightarrow (\text{Tr. } A^s)^{1/s}, A \geq 0 \quad (4.37)$$

für $s \geq 1$ konvex und für $0 \leq s \leq 1$ konkav ist. Diese Aussage bleibt auch erhalten, wenn man die Spur für $s \geq 1$ durch $e_m^+(\cdot)$ und für $0 \leq s \leq 1$ durch $e_m^-(\cdot)$ ersetzt. Für Matrizen, die nicht positiv definit oder auch nur hermitisch sind, gibt es eine Reihe Verallgemeinerungen dieser Ungleichungen, siehe z. B. [2]. Auf dem ganzen reellen Zahlenraum ist ferner die Funktion

$$\ln \sum e^{\lambda_i}$$

konvex. Mit Satz 4.4. folgt hieraus sofort:

$$H \rightarrow \ln \text{Tr. } e^H \quad (4.38)$$

ist ein für alle hermitischen Matrizen erklärtes konvexes Funktional.

4.4. G -invariante konvexe Funktionale

Leider sind Verallgemeinerungen von Satz 4.4. nicht bekannt, wohl aber kann Lemma 4.4. und seine „Umkehrung“ gezeigt werden.

Sei G eine kompakte Gruppe unitärer Matrizen. Wir betrachten eine kompakte konvexe Menge \mathfrak{R} , die G -invariant ist, d. h., die mit A stets auch die Elemente $U^{-1}AU$ für $U \in G$ enthält. Wie in der Definition 4.4. heißt ein auf \mathfrak{R} erklärtes konvexes (konkaves) Funktional G -invariant, wenn immer

$$f(U^{-1}AU) = f(A) \quad \text{alle } U \in G \quad (4.39)$$

gilt. Wir haben dann

Satz 4.5.

Sei \mathfrak{R} eine kompakte, konvexe und G -invariante Menge hermitescher Matrizen. Genau dann gilt mit $B \in \mathfrak{R}$

$$A \succ^G B \tag{4.40}$$

wenn

$$f(A) \geq f(B) \tag{4.41}$$

für alle auf \mathfrak{R} definierten konkaven und G -invarianten Funktionale f gilt.

Für die genannten Funktionale folgt zunächst (4.41) unmittelbar aus der Definition von (4.40). Gelte daher (4.41) für alle konkaven Funktionale der genannten Art. Angenommen, (4.40) gelte nicht. Dann betrachten wir die Menge aller C mit $C \succ^G B$, die wir \mathfrak{R}_0 nennen wollen. \mathfrak{R}_0 ist eine in \mathfrak{R} enthaltene kompakte konvexe Menge, die G -invariant ist. Da $A \notin \mathfrak{R}_0$ sein soll, gibt es ein lineares Funktional φ und eine Konstante φ_0 , so daß $\varphi(A) + \varphi_0 = -1$ und $\varphi(C) + \varphi_0 \geq 0$ für alle $C \in \mathfrak{R}_0$ gilt (siehe z. B. [4]).

$$D \rightarrow \varphi(U^{-1}DU) + \varphi_0$$

ist linear und daher trivialerweise konkav. Also ist

$$f(C) = \inf_{U \in G} \varphi(U^{-1}DU) + \varphi_0$$

ein überall erklärtes konkaves Funktional (Lemma 4.1.). Es gilt

a) $f(A) \leq -1$;

b) $f(G) \geq 0$ für $C \in \mathfrak{R}_0$,

denn $\varphi(U^{-1}CU) + \varphi_0 \geq 0$ da $U^{-1}CU \in \mathfrak{R}_0$ für $C \in \mathfrak{R}_0$;

c) $f(U^{-1}DU) = f(D)$ alle $U \in G$,

denn G ist eine Gruppe.

Somit haben wir ein konkaves Funktional, das G -invariant ist, auf \mathfrak{R} erklärt ist und für das $f(A) < f(B)$ gilt. Daher ist die Annahme $A \notin \mathfrak{R}_0$ falsch, und (4.40) folgt aus der Gültigkeit von (4.41) für die genannten Funktionale $|\cdot|$.

5. Stetigkeit, differenzielle Kriterien für Konvexität

Im Abschnitt 5.1. werden der Zusammenhang zwischen Konvexität und Stetigkeit von Funktionalen untersucht und die für die Charakterisierung der Gleichgewichte (Kapitel 6.) notwendigen Aussagen über Extrema zusammengestellt. Abschnitt 5.2. bringt die manchmal leicht handhabbaren differenziellen Kriterien für konvexe (konkave) Funktionale. Es schließen sich die für die Statistische Physik wichtigen Spezialfälle der Kleinschen Ungleichung sowie Ungleichungen vom *Hölder-Minkowski*-Typ an.

5.1. Maxima, Minima, Stetigkeit

Auf einer kompakten konvexen Menge \mathfrak{R} betrachten wir ein stetiges konkaves Funktional f . Als konkaves Funktional kann f als eine Bewertung der Gemischtheit der Elemente von \mathfrak{R} aufgefaßt werden. Gibt es in diesem Sinne „maximal“ bewertete Elemente? Offensichtlich ja; denn als stetige Funktion nimmt f auf der kompakten Menge \mathfrak{R} sein Maximum an. Sei nun das Maximum von f an zwei Elementen x und y von \mathfrak{R} angenommen und betrachten wir die konvexe Linearkombination $\frac{1}{2}x + \frac{1}{2}y$. Wegen der Konkavheit folgt aus

$$f\left(\frac{1}{2}x + \frac{1}{2}y\right) \geq \frac{1}{2}f(x) + \frac{1}{2}f(y) = f(x) = f(y),$$

daß auch für alle konvexen Linearkombinationen $\frac{1}{2}x + \frac{1}{2}y$ das Funktional f sein Maximum annimmt. Also haben wir

Lemma 5.1.

Ist f auf der kompakten konvexen Menge \mathfrak{R} stetig und konkav, so ist

$$\mathfrak{R}_0 = \{x_0 \in \mathfrak{R} : f(x_0) \geq f(x) \text{ alle } x \in \mathfrak{R}\} \quad (5.1)$$

eine nicht-leere kompakte und konvexe Teilmenge von \mathfrak{R} .

Die Kompaktheit folgt aus der Stetigkeit von f , durch die \mathfrak{R}_0 notwendigerweise abgeschlossen ist. Als abgeschlossene Teilmenge einer kompakten Menge ist \mathfrak{R}_0 kompakt. |=|

Ist f unter denselben Voraussetzungen sogar streng konkav, so folgte aus $x \neq y$ und $x, y \in \mathfrak{R}_0$

$$f\left(\frac{1}{2}x + \frac{1}{2}y\right) > \frac{1}{2}f(x) + \frac{1}{2}f(y) = f(x).$$

Im Gegensatz zur Annahme kann daher das Maximum von f nicht an beiden Elementen x und y angenommen werden.

Daher gilt das einfache, aber wichtige

Lemma 5.2.

Ein streng konkaves stetiges Funktional nimmt auf einer kompakten konvexen Menge in genau einem Punkt sein Maximum an.

Dieser Sachverhalt findet Anwendung zur Bestimmung von Gleichgewichtszuständen (siehe Abschnitt 6.). |=|

In den obigen Lemmata spielt die Stetigkeit der konkaven Funktione eine besondere Rolle. Bemerkenswerterweise schließt das konkave (oder konvexe) Verhalten eines Funktional die Stetigkeit in den sog. relativ inneren Punkten von selbst ein. Diesem Sachverhalt wollen wir uns nun zuwenden und vorher noch bemerken, daß nur für konvexe Mengen in endlich-dimensionalen linearen Räumen die Verhältnisse so einfach sind.

Sei \mathfrak{R} eine konvexe Menge. Man kann \mathfrak{R} in den „Rand“ $\partial\mathfrak{R}$ und in die Menge der relativ inneren Punkte $\text{int } \mathfrak{R}$ zerlegen:

$$\mathfrak{R} = \text{int } \mathfrak{R} \cup \partial\mathfrak{R}, \text{int } \mathfrak{R} \cap \partial\mathfrak{R} = \text{leer.} \quad (5.1)$$

Die genaue Definition ist folgende: Sei $x_0 \in \mathfrak{R}$ und y_1, \dots, y_m eine Basis des von allen $x - x_0, x \in \mathfrak{R}$ aufgespannten linearen Raumes. Genau dann ist $x_0 \in \text{int } \mathfrak{R}$, wenn für ein $\varepsilon > 0$ alle Vektoren

$$\alpha_1 y_1 + \dots + \alpha_m y_m + x_0, |\alpha_j| < \varepsilon$$

in \mathfrak{R} liegen.

Ist $x_0 \in \mathfrak{R}$ aber $x_0 \notin \text{int } \mathfrak{R}$, so schreiben wir $x_0 \in \partial \mathfrak{R}$. Es ist $\text{ex } \mathfrak{R} \subseteq \partial \mathfrak{R}$, aber nicht jeder Punkt aus $\partial \mathfrak{R}$ muß Extrempunkt sein.

Die Menge $\text{int } \mathfrak{R}$ ist konvex.

Hier noch eine andere interessante Definition der relativ inneren Punkte. Sei $\mathfrak{R}_0 \subseteq \mathfrak{R}$ eine konvexe Teilmenge. \mathfrak{R}_0 heißt *extremal* in \mathfrak{R} , wenn aus

$$\sum p_j x_j \in \mathfrak{R}_0, p_j > 0, \sum p_j = 1, x_j \in \mathfrak{R}$$

stets

$$x_j \in \mathfrak{R}_0 \quad \text{alle } j$$

folgt. Hiernach sind die Extrempunkte genau die einpunktigen extremalen Mengen.

Es gilt: $x_0 \in \text{int } \mathfrak{R}$ genau dann, wenn aus $x_0 \in \mathfrak{R}_0 \subseteq \mathfrak{R}$ mit extremalem \mathfrak{R}_0 stets $\mathfrak{R}_0 = \mathfrak{R}$ folgt. Eine extremale Menge einer konvexen Menge \mathfrak{R} , die einen inneren Punkt von \mathfrak{R} enthält, kann nur \mathfrak{R} selbst sein.

Für den Beweis des folgenden Satzes verweisen wir auf [35] oder [43].

Satz 5.1.

Ist f ein konkaves oder konvexes Funktional auf der konvexen Menge \mathfrak{R} , so ist f auf $\text{int } \mathfrak{R}$ stetig.

Folgerung: Die Summe der m größten bzw. kleinsten Eigenwerte e_m^+ bzw. e_m^- einer hermiteschen Matrix ist nach Satz 4.1. konvex bzw. konkav. Als konvexe Menge besteht der lineare Raum aller hermiteschen Matrizen nur aus inneren Punkten. $e_m^+(\cdot)$ und $e_m^-(\cdot)$ sind daher stetige Funktionen. Alle Funktionale auf Mengen hermitescher Matrizen, die als stetige Funktionen ihrer geordneten Eigenwerte aufgefaßt werden können, sind daher stetig.

Durch Satz 5.1. haben wir gesehen, daß sich konkave Funktionale an relativ inneren Punkten stetig verhalten. Auf dem Rand dagegen können sie sehr irregulär sein. Unter Umständen hat man daher die Randwerte eines konkaven Funktionals f zu glätten.

Ist f auf \mathfrak{R} konkav, so setzen wir

$$\tilde{f}(x_0) = \lim_{x \rightarrow x_0, x \in \text{int } \mathfrak{R}} f(x). \quad (5.2)$$

Wegen Satz 5.1. ist offenbar

$$\tilde{f}(x) = f(x) \quad \text{für } x \in \text{int } \mathfrak{R}. \quad (5.3)$$

\tilde{f} heißt Regularisation von f und ist $\tilde{\tilde{f}} = \tilde{f}$. Die Regularisierung eines konkaven Funktionals führt auf ein halbstetiges konkaves Funktional.

Bemerkung 1: Ist f konkav, so haben wir in (5.2) den oberen Limes zu betrachten.

Bemerkung 2: Ist f konkav und halbstetig, so lassen wir

$$f(x_0) = -\infty \quad \text{für } x_0 \in \partial \mathfrak{K} \text{ zu.}$$

Die Halbstetigkeit (von oben) ist für die Annahme des Minimums eines konkaven Funktionals wichtig:

Lemma 5.3.

Ist f konkav und halbstetig auf der kompakten konvexen Menge \mathfrak{K} , so ist entweder

$$\inf_{x \in \mathfrak{K}} f(x) = -\infty,$$

oder es gibt einen Extrempunkt $x_1 \in \text{ex } \mathfrak{K}$ mit

$$f(x_1) \leq f(x), \quad \text{alle } x \in \mathfrak{K}.$$

Beweis: Sei $-\infty < \alpha = \inf f(x)$. Es gibt eine Folge $\{x_j\}$, $x_j \in \text{int } \mathfrak{K}$ mit $\lim f(x_j) = \alpha$. Da \mathfrak{K} kompakt ist, kann die Folge $\{x_j\}$ als konvergent gegen ein $x \in \mathfrak{K}$ vorausgesetzt werden. Wegen $f(x) \leq \lim f(x_j)$ muß dann $f(x) = \alpha$ sein. Nun gibt es eine konvexe Linearkombination

$$x = \sum p_i y_i, \quad p_i > 0, \quad y_i \in \text{ex } \mathfrak{K}$$

(Lemma 2.3.) und wegen der Konkavität von f ist

$$\alpha = f(x) \geq \sum p_j f(y_j).$$

Da alle Werte $f(y_j)$ größer oder gleich α nach Voraussetzung sein müssen, wird der Wert α an den Extrempunkten y_i tatsächlich angenommen. $|=|$

5.2. Differentielle Kriterien

Betrachten wir zunächst eine konkave Funktion $r(s)$ im Intervall $[\alpha, \beta]$. Ist $r(s)$ zweimal differenzierbar, so ist $r''(s) \leq 0$; denn es ist

$$r''(s) = \lim_{\varepsilon} 1/\varepsilon [r(s + \varepsilon) + r(s - \varepsilon) - 2r(s)],$$

und die Konkavität bedeutet

$$\frac{1}{2}r(s + \varepsilon) + \frac{1}{2}r(s - \varepsilon) \leq r(s).$$

Sei nun umgekehrt $r''(s) \leq 0$ in $[\alpha, \beta]$. Dies ist genau dann der Fall, wenn $r'(s)$ monoton fällt. Ist aber $r'(s)$ monoton fallend, so ist $r(s)$ konkav; denn es folgt dann

$$\int_s^{s+\delta} r'(s) ds \leq \int_{s-\delta}^s r'(s) ds$$

und daher

$$r(s + \delta) - r(s) \leq r(s) - r(s - \delta)$$

bzw.

$$\frac{1}{2}r(s_1) + \frac{1}{2}r(s_2) \leq r(s), \quad s + \delta = s_1, \quad s - \delta = s_2.$$

Ist daher $r(s)$ zweimal differenzierbar im Intervall, so sind die folgenden drei Aussagen äquivalent:

- $r(s)$ ist konkav.
- $r'(s)$ ist monoton fallend.
- $r''(s) \leq 0$.

Dabei haben wir allerdings noch von der Ungleichung von *Jensen* Gebrauch gemacht, die wir hier gleich allgemein formulieren wollen.

Lemma 5.4.

Ist $f(x)$ auf der konvexen Menge \mathfrak{R} stetig und gelte stets

$$f\left(\frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{2}x_2\right) \geq \frac{1}{2}f(x_1) + \frac{1}{2}f(x_2)$$

für alle Elemente x_1, x_2 aus \mathfrak{R} , so ist f konkav auf \mathfrak{R} .

Einen Beweis der Ungleichung von *Jensen* findet man in [35].

Nun wenden wir uns dem allgemeinen Fall zu und betrachten ein auf der konvexen Menge \mathfrak{R} definiertes, zweimal differenzierbares konkaves Funktional f . Die Funktion

$$g(p) = f(px_1 + (1 - p)x_2) \tag{5.4}$$

ist konkav im Intervall $0 \leq p \leq 1$. Sind nämlich s_1 und s_2 Zahlen zwischen Null und Eins und ist $1 \geq p \geq 0$, $s = ps_1 + (1 - p)s_2$, so ist

$$g(s) = f(pt_1 + (1 - p)t_2) \geq pf(t_1) + (1 - p)f(t_2)$$

mit

$$t_i = s_i x_1 + (1 - s_i)x_2$$

und somit $f(t_i) = g(s_i)$. Umgekehrt ist

$$f(px_1 + (1 - p)x_2) \geq pf(x_1) + (1 - p)f(x_2)$$

nichts anderes als die Konkavität von $g(s)$ für $s_1 = 1, s_2 = 0$. Daher ist f konkav, wenn alle Funktionen (5.4) konkav auf $[0, 1]$ sind. Letzteres ist aber der Fall, wenn für die Funktionen (5.4) gilt

$$\frac{d^2}{dp^2} g \leq 0. \tag{5.5}$$

Sei nun y_1, \dots, y_m eine Basis des von allen $x - x'$ mit $x, x' \in \mathfrak{R}$ erzeugten linearen Raumes. Wegen

$$px_1 + (1 - p)x_2 = x_2 + p(x_1 - x_2)$$

gibt es Zahlen $\alpha_1, \dots, \alpha_m$ mit

$$x_1 - x_2 = \alpha_1 y_1 + \dots + \alpha_m y_m.$$

Daher ist

$$\frac{d^2 g}{dp^2} = \sum \frac{\partial^2 f}{\partial y_i \partial y_n} \cdot \frac{\partial y_i}{\partial p} \cdot \frac{\partial y_n}{\partial p}. \quad (5.6)$$

Vergleichen wir (5.6) mit der Forderung (5.4), so sehen wir

Satz 5.2.

Sei f ein Funktional auf der konvexen Menge \mathfrak{R} . Sei y_1, \dots, y_m eine Basis des von allen Vektoren $x - x'$ mit $x, x' \in \mathfrak{R}$ erzeugten linearen Raumes. f ist genau dann konkav auf $\text{int } \mathfrak{R}$, wenn auf $\text{int } \mathfrak{R}$ die Matrix

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y_i \partial y_j} \quad i, j = 1, \dots, m \quad (5.7)$$

negativ semidefinit ist.

Analog bedeutet die positive Halbdefinitheit von (5.7) die Konvexität des Funktionals f auf den inneren Punkten von \mathfrak{R} .

Bemerkung: Am Satz 5.2. ist die zweimalige Differenzierbarkeit, die zur Bildung von (5.7) erforderlich ist, manchmal hinderlich. Setzen wir für f nur die Stetigkeit in den inneren Punkten voraus, was nach Satz 5.1. für konkave Funktionale sowieso notwendig ist, bleibt Satz 5.2. richtig, wenn wir seine Aussage im distributionstheoretischen Sinne auffassen: Für jede nicht-negative Testfunktion $\varphi \geq 0$, deren Träger in $\text{int } \mathfrak{R}$ liegt, muß die Matrix

$$\int_{\mathfrak{R}} f(x) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y_i \partial y_k} d^m x \quad (5.8)$$

negativ semidefinit sein für konkaves f und umgekehrt [35, 43]. $|\equiv|$

Beispiel: Für natürliches n ist $\text{Tr. } X^n$ konvex. Aus der Formel

$$\frac{d}{d\lambda} (X + \lambda A)^n = \sum_{i+j=n-1} X^i A X^j \quad (5.9)$$

folgt, daß für jedes positive X die Formel

$$\langle A, B \rangle = \text{Tr.} \sum_{i+j=n-1} X^i A X^j B \quad (5.10)$$

nach Satz 5.2. ein positiv-semidefinites Skalarprodukt im linearen Raum aller hermiteschen Matrizen definiert. $|\equiv|$

Aus (5.9) folgt weiterhin für Polynome und daraus durch Grenzübergang für alle stetig differenzierbaren Funktionen die Formel

$$\frac{d}{d\lambda} \text{Tr. } r(X + \lambda A) = \text{Tr. } r'(X) A, \quad (5.11)$$

die wir weiter unten benutzen. $|\equiv|$

Seien nun x_1, x_2 zwei Elemente der konvexen Menge \mathfrak{K} und f ein auf \mathfrak{K} definiertes differenzierbares konkaves Funktional. Wir bilden die Funktion (5.4) und sehen, daß nach dem Taylorschen Satz

$$g(\vartheta) = g(0) + \vartheta g'(0) + \frac{\vartheta^2}{2} g''(\vartheta), \quad 0 \leq \vartheta \leq 1$$

ist. Wegen der Konkavität von g ist daher stets

$$g(1) - g(0) - g'(0) \leq 0. \quad (5.12)$$

Dies ist der Inhalt des allgemeinen Lemmas von *Klein*:

Lemma 5.5.

Für ein konkaves differenzierbares Funktional f auf einer konvexen Menge \mathfrak{K} gilt stets

$$f(x_1) - f(x_2) - \frac{d}{d\lambda} f(x_2 + \lambda(x_1 - x_2))_{\lambda=0} \leq 0. \quad (5.13)$$

Aus dem Satz von *von Neumann* (Satz 4.1.) ergeben sich leicht einige wichtige spezielle Kleinsche Ungleichungen.

Sei nämlich $r(s)$ im Intervall $[\alpha, \beta]$ konkav, dann ist $\text{Tr. } r(A)$ in $[\alpha, \beta]_n$ konkav. Sind A_1, A_2 innere Punkte von $[\alpha, \beta]_n$, so ist nach Formel (5.11) und Lemma 5.5. stets

$$\text{Tr. } r(A_1) - \text{Tr. } r(A_2) - \text{Tr. } r'(A_2) \cdot (A_1 - A_2) \leq 0. \quad (5.14)$$

Wenden wir dieses auf die speziellen Funktionen $-x^s, e^{-x}, \ln x, -x \ln x$ an, so erhalten wir

$$\text{Tr. } A_1^s \geq \text{Tr. } A_2^s + s \text{Tr. } A_2^{s-1} (A_1 - A_2) \quad \text{für } s \geq 1 \quad (5.15)$$

$$\text{Tr. } e^{A_1} \geq \text{Tr. } e^{A_2} + \text{Tr. } e^{A_2} (A_1 - A_2) \quad (5.16)$$

$$\text{Tr. } \ln A_1 \leq \text{Tr. } \ln A_2 + \text{Tr. } A_2^{-1} (A_1 - A_2) \quad (5.17)$$

$$\text{Tr. } A_1 \ln A_1 \geq \text{Tr. } A_1 \ln A_2 + \text{Tr. } (A_1 - A_2). \quad (5.18)$$

Wendet man Lemma 5.5. auf das konkave Funktional (4.38) an, so erhält man die Ungleichung [25]

$$\text{Tr. } e^{A_2} (A_1 - A_2) \geq \text{Tr. } e^{A_2} [\ln \text{Tr. } e^{A_1} - \ln \text{Tr. } e^{A_2}]. \quad (5.19)$$

Im folgenden wollen wir noch etwas näher auf die Ungleichung (5.15) eingehen. Wegen des Verhaltens der reellen Funktion u^s auf der positiven Halbachse gilt (5.16) nicht nur für $s \geq 1$, sondern auch für $s \leq 0$. Für $0 \leq s \leq 1$ kehrt sich dagegen das Kleiner-Gleich-Zeichen um.

Definieren wir zur Vereinfachung der angeführten Ungleichungen die Mengen

$$\Phi_s = \{A \geq 0: \text{Tr. } A^s = 1\}. \quad (5.20)$$

Dann können wir (5.15) mit den eben diskutierten Erweiterungen so schreiben:

$$1 \geq \text{Tr. } A^{s-1}B \quad \text{für } 1 \leq s; A, B \in \Phi_s \quad (5.21 \text{ a})$$

$$1 \leq \text{Tr. } A^{s-1}B \quad \text{für } s \leq 1 \quad \text{und } A, B \in \Phi_s. \quad (5.21 \text{ b})$$

Definieren wir die reelle Zahl t durch

$$\frac{1}{s} + \frac{1}{t} = 1 \quad \text{so } A^{s-1} \in \Phi_t \quad \text{für } A \in \Phi_s. \quad (5.22)$$

Also gilt für $A \in \Phi_s, B \in \Phi_t$

$$1 \geq \text{Tr. } AB, \quad \text{für } 1 \leq s.$$

Indem wir die zur Bildung von (5.20) erforderliche Normierung für eine beliebige positive Matrix durchführen, erhalten wir die Operatorform der Hölder–Minkowskischen Ungleichungen:

$$(\text{Tr. } A^s)^{1/s} (\text{Tr. } B^t)^{1/t} \geq \text{Tr. } AB \quad \text{für } s \geq 1 \quad (5.23 \text{ a})$$

$$(\text{Tr. } A^s)^{1/s} (\text{Tr. } B^t)^{1/t} \leq \text{Tr. } AB \quad \text{für } s \leq 1. \quad (5.23 \text{ b})$$

Wir erhalten aus diesen Gleichungen auch die Darstellungen

$$(\text{Tr. } A^s)^{1/s} = \sup \text{Tr. } AB, B \in \Phi_t \quad \text{für } s \geq 1 \quad (5.24 \text{ a})$$

$$(\text{Tr. } A^s)^{1/s} = \inf \text{Tr. } AB, B \in \Phi_t \quad \text{für } s \leq 1, \quad (5.24 \text{ b})$$

die wegen des Lemmas 4.1. die bereits am Ende des Kapitels 4. aus anderen Gründen erschlossene Konvexität bzw. Konkavität (Höldersche Ungleichungen für Matrizen) zeigt:

Das Funktional

$$A \rightarrow (\text{Tr. } A^s)^{1/s}$$

ist konvex für $s \geq 1$ und konkav für $s \leq 1$.

Das eben erläuterte Verfahren, aus Ungleichungen des Typs von Lemma 5.5. konkave bzw. konvexe Funktionale nach (5.24) durch ein Infimum bzw. Supremum darzustellen, wird von *Bellmann* [19] als „Quasilinearisierung“ bezeichnet. |=|

Obige Ableitungen ergeben auch einen weiteren Beweis für die Konvexität von $\ln \text{Tr. } e^x$, da

$$\lim_m m \left\{ \left(\text{Tr. } \left(E + \frac{H}{m} \right)^m \right)^{1/m} - 1 \right\} = \ln \text{Tr. } \exp H \quad (5.25)$$

gilt und nach Lemma 4.1. der Limes von Folgen konvexer Funktionen wieder konvex ist. |=|

6. Gleichgewichte

Die Frage nach der Gleichgewichtslage eines physikalischen Systems bei gegebenen „äußeren“ Bedingungen kann von verschiedenen Gesichtspunkten angegangen werden. Hier wird versucht, eine sehr allgemeine Definition zu geben, die wohl der Gibbsschen Auffassung besonders nahe kommt und auf der Relation „gemischter als“ basiert. Danach wird ein Zustand als eine Gleichgewichtslage angesehen, wenn er in der Menge aller Zustände, die die gegebenen („äußeren“ oder „makroskopischen“ oder allgemeineren) Bedingungen erfüllen, ein maximal gemischter Zustand ist. Die „Bedingungen“ werden dabei durch die Vorgabe von Erwartungswerten von Observablen eingeführt. Diese vorgegebenen Erwartungswerte brauchen zeitlich keineswegs konstant zu sein, und die Observablen müssen auch nicht notwendigerweise mit dem Hamiltonoperator kommutieren. Daher brauchen diese allgemeinen Gleichgewichtslagen nicht stationär zu sein, sondern es kann die Möglichkeit in Betracht gezogen werden, daß die zeitliche Entwicklung eines Systems im Durchlaufen verschiedener Gleichgewichtslagen besteht, wobei jede durch andere Nebenbedingungen charakterisiert sein kann.

Nur in einigen besonderen Fällen ergibt jedoch die Forderung nach maximaler Gemischtheit auch Eindeutigkeit: Es kann mehrere solche Gleichgewichtslagen geben. Eindeutigkeit kann jedoch durch Maximierung eines streng konkaven Funktionals erreicht werden (Abschnitt 6.2.). Die Auswahl dieses Funktionals wird durch die Forderung erreicht, daß die Gibbsschen Zustände die Gleichgewichtszustände sind. Dadurch kommen wir zu Entropiemaximierung (Abschnitt 6.3.). Einige besondere Eigenschaften der Entropie werden jedoch erst später (besonders bei den Untersystemen) behandelt.

6.1. Allgemeine Gleichgewichtslagen

Wir gehen vom Zustandsraum Ω aller Dichtematrizen (einer festen endlichen Dimension) aus und fragen nach Zuständen, die unter gegebenen Bedingungen als Gleichgewichtslagen angesehen werden können. Die Struktur der Bedingungen können wir uns so vorstellen.: Es sind endlich viele Observable A_1, A_2, \dots, A_m (also hermitesche Operatoren) und ihre Erwartungswerte vorgegeben. Wir betrachten also alle diejenigen Zustände ϱ , für die

$$\text{Tr. } \varrho A_j = \alpha_j, \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (6.1)$$

gilt. Dabei setzen wir voraus, daß (6.1) überhaupt eine Lösung in Ω besitzt. Bei Betrachtung thermodynamischer Probleme ist diese Voraussetzung noch so verschärft, daß „wenigen“ makroskopischen Observablen eine „große“ Zahl von mit (6.1) kompatiblen Zuständen gegenüberstehen. Die Menge

$$\mathfrak{R} = \{\varrho \in \Omega: \text{Tr. } A_j \varrho = \alpha_j, \quad j = 1, \dots, m\} \quad (6.2)$$

ist offensichtlich konvex und abgeschlossen. Als Teilmenge der kompakten Menge Ω ist sie auch kompakt. Wir können daher sagen, daß die als gegeben vorausgesetzten Bedingungen erfüllt sind, wenn ϱ in einer gewissen konvexen und kompakten Teilmenge \mathfrak{R} von Ω liegt. Daher können wir die genannte Aufgabe folgendermaßen verallgemeinern:

Gesucht sind Zustände, die Gleichgewichtslagen entsprechen, wobei die Gesamtheit der zum Vergleich zugelassenen Zustände eine kompakte konvexe Teilmenge \mathfrak{R} von Ω bildet.

Wir werden nun Gleichgewichtslagen als solche Zustände von \mathfrak{R} definieren, die bezüglich der Relation „gemischter als“ so gemischt wie möglich sind. Solche Zustände tragen dann außer der Bedingung, in \mathfrak{R} zu liegen (bzw. 6.1 zu erfüllen), so wenig wie möglich „zusätzliche“ Struktur, sie enthalten so wenig wie möglich „zusätzliche Information“. Es sind die „chaotischsten“ Zustände, die existieren, ohne die gegebenen Bedingungen zu verletzen. Diese Auffassung führt auf die folgende Definition:

Definition 6.1.

Sei \mathfrak{R} eine kompakte konvexe Teilmenge von Ω . Eine „allgemeine Gleichgewichtslage von \mathfrak{R} “ ist ein Element σ von \mathfrak{R} , für das aus $\sigma < \varrho$, $\varrho \in \mathfrak{R}$ stets $\sigma = \varrho$ folgt.

Wir zeigen nun, daß es in jeder kompakten konvexen Teilmenge \mathfrak{R} des Zustandsraumes allgemeine Gleichgewichtslagen gibt. Betrachten wir hierzu einen beliebigen Zustand ϱ aus \mathfrak{R} . Die Menge \mathfrak{R}_0 aller ϱ' , für die $\varrho < \varrho'$ sowie $\varrho' \in \mathfrak{R}$ gilt, ist kompakt und konvex (Spezialfall von Lemma 3.5.). Ist σ eine allgemeine Gleichgewichtslage von \mathfrak{R}_0 , so auch von \mathfrak{R} ; denn wäre $\sigma < \sigma'$ mit $\sigma' \in \mathfrak{R}$, so folgte wegen Satz 3.1. auch $\sigma' \in \mathfrak{R}_0$, und somit wäre nach Definition 6.1. $\sigma' = \sigma$. Nun betrachten wir die konvexen Funktionen $e_m^+(\cdot)$ und benutzen ihre Stetigkeit (Folgerung aus Satz 5.1.). Wir definieren \mathfrak{R}_j als die Menge aller Elemente von \mathfrak{R}_{j-1} , für die $e_m^+(\cdot)$ auf \mathfrak{R}_{j-1} das Minimum annimmt ($j = 1, \dots, n$). Es ist klar, daß $\mathfrak{R}_{j-1} \subseteq \mathfrak{R}_j$ gilt. Aus Lemma 5.1. folgt nun, daß mit \mathfrak{R}_{j-1} auch \mathfrak{R}_j konvex, kompakt und nicht leer ist. Sei nun

$$\sigma \in \bar{\mathfrak{R}} = \bigcap \mathfrak{R}_j$$

sowie $\sigma < \sigma'$ mit $\sigma' \in \mathfrak{R}_0$. Nach Satz 3.2. ist dann wegen

$$e_m^+(\sigma') \leq e_m^+(\sigma) \quad \text{alle } m$$

und der Definition von $\bar{\mathfrak{R}}$ auch $\sigma' \in \bar{\mathfrak{R}}$. $\bar{\mathfrak{R}}$ ist nun eine kompakte konvexe Menge, auf der sämtliche Funktionen $e_m^+(\cdot)$ konstant sind. Das kann aber nur sein, wenn diese Menge aus einem Punkt besteht; denn auf ihr ist jede unitär invariante Funktion konstant und somit auch die streng konkaven Funktionen vom Typ $\text{Tr. } r(A)$, die ja ihr Maximum auf konvexen kompakten Mengen in genau einem Punkt annehmen. σ ist daher eine Gleichgewichtslage. Wir sehen jedoch weiter: Ist σ' eine zu σ unitär äquivalente Dichtematrix, die ebenfalls in \mathfrak{R} liegt, so liegt sie auch in allen \mathfrak{R}_j und darf somit nicht von σ verschieden sein. Damit haben wir folgendes bewiesen:

Satz 6.1.

Sei ϱ ein Element der kompakten und konvexen Teilmenge \mathfrak{R} von Ω . Es gibt eine allgemeine Gleichgewichtslage σ von \mathfrak{R} mit $\varrho < \sigma$. Ist ferner σ eine beliebige allgemeine Gleichgewichtslage von \mathfrak{R} , so gibt es in \mathfrak{R} kein zu σ unitär äquivalentes Element, das von σ verschieden ist.

Der Beweis von Satz 6.1. wird durch die Bemerkung abgeschlossen, daß die Menge aller σ' mit $\sigma < \sigma'$ kompakt und konvex ist und aus lauter unitär äquivalenten Elementen besteht. Daraus folgt wie oben, daß diese Menge nur ein Element besitzen darf. |=|

Folgerung: Sei G die Gruppe aller unitären Matrizen, die \mathfrak{R} als Ganzes in sich über-

führen, d. h., aus $U \in G$ folgt für jedes $\varrho \in \mathfrak{K}$ auch $U\varrho U^{-1} \in \mathfrak{K}$. Da \prec eine Halbordnung der Klassen unitär äquivalenter Matrizen ist, ist mit σ auch $U\sigma U^{-1}$ eine allgemeine Gleichgewichtslage von \mathfrak{K} . Nach dem eben bewiesenen Satz ist somit $\sigma = U^{-1}\sigma U$. Dies wollen wir so ausdrücken:

Lemma 6.1.

Jede allgemeine Gleichgewichtslage σ von \mathfrak{K} ist maximal symmetrisch, d. h., ist

$$U\mathfrak{K}U^{-1} = \mathfrak{K}$$

für ein unitäres U , so auch

$$U\sigma U^{-1} = \sigma.$$

6.2. f -Gleichgewichte

Sei wieder \mathfrak{K} eine kompakte und konvexe Teilmenge von \mathcal{Q} . Ist f ein stetiges und streng konkaves Funktional auf \mathcal{Q} , so wird das Maximum von f auf \mathfrak{K} nach Lemma 5.2. in genau einem Punkt angenommen:

$$f(\varrho_0) \geq f(\varrho), \quad \text{alle } \varrho \in \mathfrak{K}; \varrho_0 \in \mathfrak{K}. \quad (6.3)$$

Dieser durch f und \mathfrak{K} eindeutig bestimmte Zustand heißt „ f -Gleichgewicht von \mathfrak{K} “. Es gilt dann

Lemma 6.2.

Ist das stetige und streng konkave Funktional f unitär invariant, so ist das f -Gleichgewicht von \mathfrak{K} eine allgemeine Gleichgewichtslage von \mathfrak{K} .

Ist nämlich σ das f -Gleichgewicht von \mathfrak{K} und gilt $\sigma \prec \sigma'$, so folgt $f(\sigma) = f(\sigma')$ und daher $f(\sigma) = f(\sigma')$. Das Maximum wird aber an genau einer Stelle angenommen.

Lemma 6.3.

Sei f ein streng konkaves Funktional auf \mathfrak{K} . Gilt dann für ein $\varrho_0 \in \mathfrak{K}$ die Relation

$$\frac{d}{d\lambda} f(\varrho_0 + \lambda(\varrho - \varrho_0))_{\lambda=0} = 0 \quad (6.4)$$

für alle $\varrho \in \mathfrak{K}$, so ist ϱ_0 das f -Gleichgewicht von \mathfrak{K} .

Beweis: Nach Lemma 5.5., Formel (5.13), gilt nämlich in diesem Falle mit $\varrho \in \mathfrak{K}$ stets $f(\varrho_0) \geq f(\varrho)$. $|\Rightarrow|$

Bemerkung: Ist das f -Gleichgewicht von \mathfrak{K} ein relativ innerer Punkt von \mathfrak{K} , so gilt die Relation (6.4); denn dann kommen die Regeln der Differentialrechnung für das Aufsuchen der Extrema zur Anwendung. $|\Rightarrow|$

6.3. Entropie

Die Funktion $-s \ln s$ ist auf der positiven Zahlengeraden definiert, und ihre zweite Ableitung ist $-s^{-1}$ und daher überall negativ. Den Wert der Funktion für $s = 0$ er-

klären wir zu Null. Dann ist die genannte Funktion stetig und streng konkav im Intervall $0 \leq s < \infty$. Aus diesem Grunde (Folgerung aus Satz 4.3.) ist das Funktional

$$S(A) = -\text{Tr. } A \ln A \quad (6.5)$$

auf der Menge aller positiv-halbdefiniten Matrizen streng konkav.

Definition 6.2.

Der Wert $S(\varrho)$ für einen Zustand ϱ heißt „Entropie von ϱ “. Das S-Gleichgewicht einer kompakten konvexen Teilmenge \mathfrak{R} von Ω bezeichnen wir als „den Gleichgewichtszustand von \mathfrak{R} “.

Es gilt die einfache Beziehung

$$S(\lambda A) = \lambda S(A) - (\text{Tr. } A) \lambda \ln \lambda, \quad \lambda \geq 0. \quad (6.6)$$

Schreiben wir weiter mit den positiven Matrizen A und B die wegen der Konkavität der Entropie gültige Ungleichung

$$S\left(\frac{A+B}{2}\right) \geq \frac{1}{2}S(A) + \frac{1}{2}S(B), \quad (6.7)$$

so erhalten wir mit (6.6) die weitere Ungleichung

$$S(A) + S(B) \leq S(A+B) + (\ln 2) \text{Tr. } (A+B). \quad (6.8)$$

(Man beachte dabei, daß $\ln 2$ kleiner als 1 ist.) $|=|$

Satz 6.2.

Seien A_1, A_2, \dots, A_m hermitische Matrizen und sei

$$\mathfrak{R} = \{\varrho \in \Omega: \text{Tr. } A_j \varrho = \alpha_j, \quad j = 1, \dots, m\} \quad (6.9a)$$

nicht leer. Dann gibt es Zahlen $Z > 0, \beta_1, \dots, \beta_m$ so, daß

$$\varrho = Z^{-1} \exp[-\beta_1 A_1 - \dots - \beta_m A_m] \quad (6.9b)$$

der Gleichgewichtszustand von \mathfrak{R} ist.

Beweis: Zum Beweis stützen wir uns auf Lemma 6.3. und zeigen das Verschwinden der entsprechenden Ableitungen für eine Dichtematrix der Form (6.9). Dabei haben wir von der Tatsache Gebrauch gemacht, daß, wenn immer die Menge (6.2) nicht leer ist, auch ein ϱ der Form (6.9) in ihr liegt [41].

Sei nun ξ der Parameter einer Kurve, die den durch (6.9) gegebenen Zustand für $\xi = 0$ enthält und ganz in \mathfrak{R} verläuft. Dann ist

$$\frac{\partial}{\partial \xi} S(\varrho) = -\text{Tr. } \frac{\partial \varrho}{\partial \xi} (E + \ln \varrho).$$

Da für ξ im Intervall $[0, 1]$ die Kurve $(1 - \xi) \varrho + \xi \varrho_0$ ganz in \mathfrak{R} verläuft für beliebiges $\varrho_0 \in \mathfrak{R}$, ist hierfür

$$\frac{\partial}{\partial \xi} S(\varrho) = \text{Tr. } (\varrho - \varrho_0) (E - \ln \varrho).$$

Setzen wir nun (6.9) ein und berücksichtigen, daß ϱ_0 in der Menge (6.2) liegt, so ergibt sich das Verschwinden aller ersten Ableitungen der Entropie für den Zustand (6.9), wenn die Bildung der Ableitungen aus (6.2) heraus vorgenommen wurde. Nach Lemma 6.3. ist damit Satz 6.2. bewiesen. |=|

Einen Beweis mit Hilfe von Lagrangeschen Multiplikatoren findet man in [36]. |=| Anwendungen und Interpretationen von Satz 6.2., die von der hier gegebenen verschieden sind, findet man auch in [27, 28, 29, 34]. |=|

Wir notieren zwei einfache Folgerungen für den Fall, daß wir nur den Erwartungswert des Hamiltonoperators vorschreiben (mikrokanonische Gibbssche Gesamtheit). Verallgemeinerungen sind dann leicht möglich, wenn die in (6.2) eingehenden Observablen kommutieren. Ist

$$\varrho(T) = Z^{-1} \exp(-\beta H), \quad \beta kT = 1$$

mit dem Normierungsfaktor (Zustandssumme)

$$Z = \text{Tr. exp}(-\beta H),$$

so ist nach Satz 3.4. für $0 \leq T$ der Zustand $\varrho(T)$ um so gemischerter, je größer T ist. Da $S(\varrho)$ konkav ist, ist

$$S(T) = S(\varrho(T))$$

für $0 \leq T$ monoton steigend und nach demselben Satz für $T \leq 0$ monoton fallend. Insbesondere ist

$$\frac{1}{T} \frac{dS(T)}{dT} \geq 0 \quad \text{für alle } T,$$

wie es aus physikalischen Gründen auch sein sollte. Etwas stärker ist die aus Satz 3.3 folgende Aussage: Sind H_1 und H_2 zwei hermitesche Matrizen (Hamiltonoperatoren) und befinden sich zwei Systeme in Gibbsschen mikrokanonischen Zuständen gleicher Temperatur

$$\varrho_j = Z_j^{-1} \text{Tr. exp}(-\beta H_j), \quad (6.10)$$

so haben wir

$$S(\varrho_1) \geq S(\varrho_2) \quad (6.11)$$

immer dann, wenn benachbarte Eigenwerte von H_1 enger als die entsprechenden von H_2 liegen. Genauer gesagt: Für (6.11) ist hinreichend, daß für die geordneten Eigenwertssysteme

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots, \quad \mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \quad (6.12a)$$

von H_1 und H_2 stets

$$\lambda_i - \lambda_{i+1} \geq \mu_i - \mu_{i+1} \quad (6.12b)$$

gilt. |=|

Schließlich bemerken wir noch, daß gemäß Satz 3.6. keine Messung die Entropie erniedrigt. |=|

7. Darstellungsunabhängige Definition der Entropie

Wir haben zur Definition der Entropie und zur Ableitung einiger ihrer Eigenschaften stets die Tatsache benutzt, daß jeder Zustand durch eine Dichtematrix über einem (endlich dimensional) Hilbert-Raum gegeben werden kann. Die benutzte Darstellung ist jedoch keineswegs die einzig mögliche, da jede positive Linearform über der Algebra der Matrizen gegebener Zeilen- und Spaltenzahl eine solche Darstellung induziert („GNS-Konstruktion“). Wir wollen jetzt die Frage positiv beantworten, ob sich $S(\varrho)$ nicht allein aus der Lage von ϱ als ein Element der (abstrakt gegeben gedachten) konvexen Menge Ω aller Zustände charakterisieren läßt. Es zeigt sich, daß eine solche Charakterisierung für alle konkaven Funktionen vom Typ $\text{Tr. } r(\varrho)$ auf Ω gelingt, wenn wir noch $r(0) = 0$ voraussetzen [38].

Mit

$$\Psi \tag{7.1}$$

wollen wir die Familie aller Folgen reeller Zahlen $\{p_j\}$, $j = 1, 2, \dots$ mit folgenden Eigenschaften bezeichnen:

- a) $p_i \geq 0$ für alle i .
- b) Nur endlich viele der p_i sind von Null verschieden.
- c) $\sum p_j = 1$.
- d) Es ist für alle i stets $p_i \geq p_{i+1}$.

Sei nun \mathfrak{M} eine Teilmenge des reellen linearen Raumes Ω . Ist y ein Element der konvexen Hülle $[\mathfrak{M}]$ von \mathfrak{M} , so definieren wir die Teilfamilien

$$\Psi(\mathfrak{M}, y) \tag{7.2}$$

von (7.1) wie folgt: Die Folge $\{p_j\}$ gehört zu (7.2) genau dann, wenn es Elemente $x_i \in \mathfrak{M}$ so gibt, daß

$$y = \sum p_j x_j \tag{7.3}$$

gilt.

Lemma 7.1.

Sei

$$\{p_j\} \in \Psi(\mathfrak{M}, x), \{q_j\} \in \Psi(\mathfrak{M}, y)$$

und gelte

$$z = px + qy \quad \text{konvexe Summe.}$$

Dann gehört die gemäß d) geordnete Folge

$$\{pp_j\} \cup \{qq_i\} \quad \text{zu } \Psi(\mathfrak{M}, z).$$

Der Beweis des Lemmas ist eine unmittelbare Folge aus den entsprechenden Definitionen.

Wir wenden nun obige Begriffsbildung auf den Fall an, bei dem der lineare Raum \mathfrak{L} die Menge aller hermiteschen Matrizen und die Menge \mathfrak{M} die Gesamtheit ex Ω aller Extrempunkte von Ω ist.

Ist ϱ eine Dichtematrix und sind $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ ihre sämtlichen Eigenwerte, so setzen wir $\lambda_i = 0$ für alle $i \geq n + 1$. Die so entstehende Folge nennen wir

$$\{\lambda_i\}_\varrho. \quad (7.4)$$

Die Existenz der Spektralzerlegung bedingt dann

$$\{\lambda_i\}_\varrho \in \Psi(\text{ex } \Omega, \varrho). \quad (7.5)$$

Satz 7.1.

Ist

$$\{p_i\} \in \Psi(\text{ex } \Omega, \varrho), \quad (7.6)$$

so gilt

$$\{\lambda_i\}_\varrho < \{p_j\}. \quad (7.7)$$

Beweis: Aus der Gültigkeit von (7.6) folgt die Existenz von eindimensionalen Projektoren π_1, π_2, \dots mit

$$\varrho = \sum p_j \pi_j. \quad (7.8)$$

Sei nun ξ_1, \dots, ξ_s ein vollständiges Orthonormalsystem des linearen Unterraumes

$$\pi_1 \mathfrak{L} + \pi_2 \mathfrak{L} + \dots + \pi_n \mathfrak{L},$$

dann ist $s \leq m$ und

$$\sum_{i=1}^s (\xi_i, \pi_j \xi_i) = 1 \quad \text{für } 1 \leq j \leq m.$$

Also ist

$$\sum_{i=1}^s (\xi_i, \varrho \xi_i) = \sum_{j=1}^m p_j + \sum_{i=1}^s \sum_{j=m+1}^{\infty} p_j (\xi_i, \pi_j \xi_i).$$

Der zweite Summand der rechten Seite dieser Gleichung ist positiv. Also gilt nach dem Satz von *Ky Fan* (Lemma 3.4.)

$$\lambda_1 + \dots + \lambda_m \geq \lambda_1 + \dots + \lambda_s \geq \sum_{j=1}^m p_j.$$

Damit ist der Beweis wegen Lemma 3.3. beendet. \bullet $\mid = \mid$

Wir kehren nun wieder zu dem allgemeineren Fall einer Menge \mathfrak{M} in einem reellen linearen Raum \mathfrak{L} zurück. Mit $r(p)$ bezeichnen wir eine auf dem Intervall $[0, 1]$ definierte und dort stetige und konkave Funktion, die für das Argument $p = 0$ verschwindet.

Zur Erleichterung der Ausdrucksweise in den folgenden Beweisen wollen wir folgende Verabredung treffen: Sei $\{p_j\} \in \mathcal{P}$. Die „ m - r -Indexmenge J von $\{p_j\}$ “ ist die Menge der natürlichen Zahlen, der genau m natürliche Zahlen so entnommen sind, daß stets gilt

$$r(p_i) \geq r(p_k) \quad \text{für alle } i \notin J \text{ und } k \in J. \quad (7.9)$$

Die 0- r -Indexmenge ist die Menge aller natürlichen Zahlen.

Lemma 7.2.

Gilt

$$\{p_j\} \succ \{q_i\}$$

für zwei Folgen aus \mathcal{P} und sind J bzw. I die m - r -Indexmengen von $\{p_j\}$ bzw. $\{q_i\}$, so gilt

$$\sum_{j \in J} r(p_j) \geq \sum_{i \in I} r(q_i).$$

Beweis: Aus Lemma 3.3. und dem Satz von *Birkhoff* (Lemma 3.2.) folgt die Existenz von Permutationen $q_i \rightarrow q_{t_i}$ und einer Folge $\mu_t \geq 0$ mit $\sum \mu_t = 1$ derart, daß

$$p_i = \sum_t \mu_t q_{t_i}$$

gilt. Dann ist

$$\sum_{j \in J} r(p_j) \geq \sum_t \mu_t \sum_{j \in J} r(q_{t_j}) \geq \sum_t \mu_t \sum_{i \in I} r(q_i).$$

Damit ist Lemma 7.2. gezeigt. \square

Definition 7.1.

\mathfrak{K} sei eine konvexe Menge, die als konvexe Hülle der Menge $\text{ex } \mathfrak{K}$ ihrer Extrempunkte darstellbar ist. Wir setzen

$$r(x)_m^{\mathfrak{K}} = \inf \sum_{k \in J} r(p_k), \quad (7.10)$$

wobei das Infimum alle m - r -Indexmengen J von Folgen $\{p_k\}$ aus \mathcal{P} ($\text{ex } \mathfrak{K}, x$) durchläuft. Die auf dem Intervall $[0, 1]$ erklärte Funktion r ist dort stetig und konkav mit $r(0) = 0$ vorausgesetzt.

Bemerkung: Für allgemeinere konvexe Mengen findet man eine mögliche Definition in [38]. Für kompakte konvexe Mengen gilt nach Lemma 2.3. die Voraussetzung über \mathfrak{K} . \square

Wir wollen nun eine Folgerung aus Lemma 7.1. ziehen und dann zum spezielleren Fall des Zustandsraumes zurückkehren. Mit $s \rightarrow r(ps)$ gilt für $0 \leq p \leq 1$ und $p + q = 1$ die Ungleichung

$$r(px + qy)_m^{\mathfrak{K}} \leq r(px)_j^{\mathfrak{K}} + r(qy)_k^{\mathfrak{K}}, \quad j + k = m. \quad (7.11)$$

Nun betrachten wir den Fall $\mathfrak{K} = \Omega$. Das in Definition 7.1. zu bildende Infimum kön-

nen wir berechnen; denn $\Psi(\text{ex } \Omega, \varrho)$ enthält nach Satz 7.1. genau eine minimal gemischte Folge, und das bedeutet nach Lemma 7.2., daß das Infimum für diese Folge angenommen wird. Damit aber haben wir mit (7.4) wegen

$$\sum_{j \in J} r(\lambda_j) = e_{n-m}^-(r(\varrho))$$

bewiesen:

Satz 7.2.

Ist die auf $[0, 1]$ stetige Funktion $r(s)$ konkav und gilt $r(0) = 0$, so haben wir

$$r(\varrho)_m^\Omega = e_{n-m}^-(r(\varrho)), \quad n > m \geq 0, \quad (7.12)$$

$$r(\varrho)_m^\Omega = 0, \quad m \geq n.$$

Damit ist die angekündigte darstellungsunabhängige Charakterisierung der Funktionale vom Typ $\text{Tr. } r(A)$ erreicht. Formel (7.11) gibt uns nun wegen (7.12) folgende für Matrizen als $[0, 1]_n$ gültige Ungleichung:

Lemma 7.3.

Die Funktion r genüge den Voraussetzungen des Satzes 7.2. Gilt für drei Matrizen aus $[0, 1]_n$ die Beziehung

$$A_1 + A_2 = A, \quad (7.13)$$

so folgt für $m = i + j - n \geq 0$

$$e_m^-(r(A)) \leq e_i^-(r(A_1)) + e_j^-(r(A_2)). \quad (7.14)$$

Bemerkung: Ist die Funktion r im Intervall $[0, a]$ mit den in Satz 7.2. geforderten Eigenschaften ausgestattet, so gilt (7.14), wenn die drei in (7.13) eingehenden Matrizen sämtlich in $[0, a]_n$ liegen. |=|

Nach Satz 4.1. sind im Fall $\mathfrak{R} = \Omega$ die durch Definition 7.1. gegebenen Funktionen konkav. Dies ist i. a. nicht der Fall: Ist \mathfrak{R} ein Quadrat in der Ebene, so ist auch für $m = 0$ die mit Definition 7.1. konstruierte Funktion nicht konkav für konkaves r .

8. Symmetrien

8.1. Allgemeine Form einer Symmetrie

Eine Symmetrie des Zustandsraumes Ω ist eine affine Abbildung von Ω auf Ω , d. h. eine Abbildung des Zustandsraumes auf sich, die der Beziehung

$$(p\varrho_1 + (1-p)\varrho_2)^\sigma = p\varrho_1^\sigma + (1-p)\varrho_2^\sigma, \quad 0 \leq p \leq 1 \quad (8.1a)$$

genügt. Sei σ eine Symmetrie des Zustandsraumes. Da nach Satz 7.2. eine Definition z. B. des Funktional $-\text{Tr. } \varrho^2$ existiert, die nur von der Struktur des Zustandsraumes Gebrauch macht, gilt

$$\text{Tr. } \varrho^2 = \text{Tr. } (\varrho^\sigma)^2; \quad \sigma \text{ ist Symmetrie.} \quad (8.1b)$$

Ist π ein eindimensionaler Projektor, so ist auch π^σ ein eindimensionaler Projektor; denn σ muß die Menge $\text{ex } \Omega$ auf sich abbilden. Wendet man nun diese Bemerkung und die Beziehung (8.1 b) auf $\varrho = \frac{1}{2}(\pi_1 + \pi_2)$ mit den eindimensionalen Projektoren π_1 und π_2 an, so findet man, daß

$$\text{Tr. } \pi_1 \pi_2 = \text{Tr. } \pi_1^\sigma \pi_2^\sigma \quad (8.1 \text{ c})$$

sein muß. σ vermittelt daher eine Abbildung der eindimensionalen Teilräume des Hilbert-Raumes \mathfrak{H} auf sich, die wegen (8.1 c) die Übergangswahrscheinlichkeiten invariant läßt. Nach einem Satz von *Wigner* und *Bargmann* [23] gibt es daher eine unitäre oder antiunitäre Abbildung des Hilbert-Raumes auf sich, die diese Zuordnung der eindimensionalen Unterräume vermittelt. Somit gilt

Satz 8.1.

Sei σ eine Symmetrie von Ω . Dann gibt es eine unitäre Matrix U , so daß für alle ϱ entweder

$$\varrho^\sigma = U \varrho U^{-1}$$

oder

$$\varrho^\sigma = U \bar{\varrho} U^{-1}$$

gilt.

8.2. Die Abbildung $A \rightarrow A^G$

Im Kapitel 3. wurde für jede Matrix A und jede kompakte Gruppe G unitärer Operatoren eine neue Matrix A^G durch die Gleichung (3.50) definiert (siehe Vorbemerkungen). Aus dieser Definition folgt unmittelbar die Linearität von A^G in A (Formel 3.53). Es wurde auch gezeigt, daß A^G die einzige mit allen Matrizen aus G vertauschbare Matrix ist, die gemischerter ist als A selbst. Eine Zusammenfassung und leichte Verallgemeinerung dieser Ergebnisse ist das folgende Lemma.

Lemma 8.1.

Sei G eine kompakte Gruppe unitärer Matrizen und \mathfrak{K} die von allen Matrizen UAU^{-1} mit $U \in G$ erzeugte konvexe Menge. Folgende Aussagen sind für hermisches A und einem B aus \mathfrak{K} gleichbedeutend:

1. $B = A^G$.
2. B vertauscht mit allen U aus G .
3. B ist eine allgemeine Gleichgewichtslage von \mathfrak{K} .

Zum Beweis brauchen wir uns nur noch mit dem dritten Punkt der Behauptung zu beschäftigen. Ist aber B eine allgemeine Gleichgewichtslage, so ist wegen Lemma 6.1. B mit allen U aus G vertauschbar. $|\cdot|$

Die schon erwähnte Beziehung (Formel 3.55)

$$A < A^G \quad (8.2)$$

impliziert natürlich

$$\text{Tr. } A = \text{Tr. } A^G. \quad (8.3)$$

Es gilt aber noch allgemeiner

$$\text{Tr. } AB^G = \text{Tr. } A^G B^G = \text{Tr. } A^G B. \quad (8.4)$$

Ist nämlich

$$A^G = \sum p_j U_j A U_j^{-1},$$

so folgt

$$\text{Tr. } A^G B^G = \sum p_j \text{Tr. } A U_j^{-1} B^G U_j,$$

was wegen der G -Invarianz von B^G auf das erste Gleichheitszeichen in (8.4) führt. Dann vertauscht man die Rollen von A und B . $|\equiv|$

Lemma 8.2.

Für zwei kompakte Gruppen unitärer Matrizen gelte

$$G_1 \subseteq G_2. \quad (8.5)$$

Dann ist

$$A^{G_2} = (A^{G_1})^{G_2}. \quad (8.6)$$

Beweis: $(A^{G_1})^{G_2}$ vertauscht mit den Matrizen aus G_2 und liegt wegen (8.5) in der von allen $U A U^{-1}$ mit $U \in G_2$ erzeugten konvexen Menge. Die fragliche Matrix muß daher nach Lemma 8.1. mit A^{G_2} übereinstimmen. $|\equiv|$

Ein wenig tiefer liegt das folgende Resultat

Lemma 8.3.

Es seien G_1 und G_2 zwei kompakte Untergruppen der kompakten Gruppe G unitärer Matrizen. Die Gruppe G werde von G_1 und G_2 erzeugt. Zu gegebener hermitescher Matrix A definieren wir zu jeder natürlichen Zahl j eine Matrix A_j wie folgt: $A_1 = A^{G_1}$, $A_{i+1} = (A_i)^{G_1}$ für gerades i und $A_{i+1} = (A_i)^{G_2}$ für ungerades i . Dann ist

$$\lim A_j = A^G.$$

Beweis: \mathfrak{R} sei die von allen $U A U^{-1}$ mit $U \in G$ erzeugte konvexe Menge. \mathfrak{R} ist kompakt (Lemma 3.5.) und alle A_j sind in \mathfrak{R} enthalten. Die Folge der A_j hat daher Häufungspunkte, die alle in \mathfrak{R} liegen. Sei \mathfrak{N} die Menge aller solcher Häufungspunkte.

Da wegen (8.2) $A_{i+1} \stackrel{G}{\succ} A_i$ für alle i gilt, ist die Folge $R(A_i)$, $i = 1, 2, \dots$, für jedes stetige G -invariante konvexe Funktional R auf \mathfrak{R} monoton fallend und daher konvergent. Daher ist jedes G -invariante konvexe und stetige Funktional auf \mathfrak{N} konstant. Nach den Sätzen 4.5. und 3.7. gibt es daher zu je zwei Elementen B_1 und B_2 aus \mathfrak{N} eine Matrix U aus G mit $U B_1 = B_2 U$. Nun ist aber mit einer Matrix B auch die Matrix B^{G_1} in \mathfrak{N} , und beide Matrizen sind daher unitär äquivalent.

Mit einem beliebigen streng konkaven G -invarianten Funktional R hätten wir dann

$$R(B) = R\left(\sum p_j U_j B U_j^{-1}\right) = R(B^{G_1}), \quad U_j \in G_1$$

und daraus folgte die Gleichheit aller $U_j B U_j^{-1}$ für $p_j \neq 0$ und daher $B = B^{G_1}$. Daher

ist B mit allen Matrizen aus G_1 vertauschbar und aus genau analogen Gründen auch mit solchen aus G_2 . Folglich ist B tatsächlich G -invariant und in \mathfrak{K} enthalten. Nach Lemma 8.1. muß nun $B = A^\sigma$ sein, und \mathfrak{K} enthält nur ein Element, weshalb die fragliche Folge gegen A^σ konvergiert. $|\cdot|$

8.3. Teilsysteme

Zum Verständnis des folgenden erinnern wir uns an die im Kapitel 2. dargelegten Aussagen, nachdem ein Zustand als ein positives normiertes lineares Funktional über der *-Algebra aller quadratischen Matrizen gegebener Zeilenzahl im einfachsten Fall aufgefaßt werden kann. Eine systematische und weiterführende Behandlung dieses Gedankens findet man in [32]. Sei nun \mathfrak{B} die Menge aller $(n \times n)$ -Matrizen, die mit der Addition und Multiplikation sowie der Involution $A \rightarrow A^*$ (Übergang zum hermitisch Konjugierten) versehen ist. Ist \mathfrak{H} ein endlich-dimensionaler Hilbert-Raum mit $\dim \mathfrak{H} = n$, so können wir \mathfrak{B} als die Menge aller linearen Abbildungen von \mathfrak{H} in \mathfrak{H} ansehen. Sei nun \mathfrak{H} das Kronecker-Produkt von Hilbert-Räumen

$$\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2. \quad (8.7)$$

Zu jeder Dichtematrix ϱ können wir die relative Spur von ϱ nach \mathfrak{H}_1 bilden und damit eine Dichtematrix über \mathfrak{H}_1 erhalten. Hierzu benutzen wir ein beliebiges vollständiges Orthonormalsystem ξ_1, \dots, ξ_{n_2} von \mathfrak{H}_2 . Sind $\eta_1, \eta_2 \in \mathfrak{H}_1$, so ist

$$(\eta_1, \varrho_1 \eta_2)_1 = \sum_{j=1}^{n_2} (\eta_1 \otimes \xi_j, \varrho \eta_2 \otimes \xi_j). \quad (8.8)$$

Dabei bezeichnet $(\cdot)_1$ das Skalarprodukt in \mathfrak{H}_1 . Wir können $\tilde{\mathfrak{B}}_1$, die Algebra aller linearen Abbildungen von \mathfrak{H}_1 in \mathfrak{H}_1 , als eine Teilalgebra von \mathfrak{B} betrachten, indem wir jedem $A_1 \in \tilde{\mathfrak{B}}_1$ die Matrix $A_1 \otimes E_2$ zuordnen. Die entstehende Teilalgebra nennen wir \mathfrak{B}_1 . Es gilt

$$(\text{Tr. } A_1 \varrho_1)_1 = \text{Tr. } (A_1 \otimes E_2) \varrho, \quad (8.9)$$

wobei $(\text{Tr. } \dots)_1$ die Spurbildung über \mathfrak{H}_1 anzeigt. Ist nämlich $\eta_1, \dots, \eta_{n_1}$ ein vollständiges Orthonormalsystem von \mathfrak{H}_1 und die η_j als Eigenvektoren von A_1 zu den Eigenwerten λ_j gewählt, so ist $\eta_j \otimes \xi_k$ ein Eigenvektor von $A_1 \otimes E_2$ und daher

$$\text{Tr. } (A_1 \otimes E_2) \varrho = \sum \lambda_j (\eta_j \otimes \xi_k, \varrho \eta_j \otimes \xi_k),$$

woraus durch Aufsummieren über k und Vergleich mit (8.8) die Formel (8.9) folgt. Nun existiert eine lineare Abbildung von \mathfrak{B} auf \mathfrak{B}_1 . Ist nämlich G_2 die Gruppe aller Matrizen der Gestalt $E_1 \otimes U_2$ mit unitärem U_2 von \mathfrak{H}_2 auf sich, so kommutieren genau die Elemente aus \mathfrak{B}_1 mit G_2 . Folglich ist

$$A \rightarrow A^{G_2} = A_1 \otimes E_2 \quad (8.10)$$

eine lineare Abbildung von \mathfrak{B} auf \mathfrak{B}_1 . Nach (8.9) ist

$$\text{Tr. } \varrho A^{G_2} = (\text{Tr. } \varrho_1 A_1)_1, \quad (8.11)$$

und wir können ϱ_1 als die Beschränkung von ϱ auf die Algebra \mathfrak{B}_1 ansehen. Wegen (8.4) folgt dann aus (8.11)

$$\varrho^{\sigma_2} = \frac{1}{n_2} \varrho_1 \otimes E_2 \quad \text{mit } n_2 = \dim \mathfrak{H}_2. \quad (8.12)$$

Ehe wir mit diesem Ergebnis weiterrechnen, haben wir einige Definitionen zu besprechen. Sei \mathfrak{B}_0 eine *-Unteralgebra von \mathfrak{B} mit Einselement. Zu ihr gehört nach Definition 1.3. ein Zustandsraum Ω_0 , der aus allen normierten positiven Funktionalen über \mathfrak{B}_0 besteht. Mit

$$S(\mathfrak{B}_0, \varrho_0), \quad \varrho_0 \in \Omega \quad (8.13)$$

bezeichnen wir dann das Funktional

$$r(\varrho_0)_m^{\Omega_0} \quad \text{mit } m = 0, r = -s \ln s \quad (8.14)$$

(siehe Definition 7.1.) und nennen seinen Wert „Entropie des Zustandes ϱ_0 von Ω_0 “. Ist $\varrho \in \Omega$ ein Zustand von \mathfrak{B} (einer Dichtematrix über \mathfrak{H} äquivalent), so bezeichnen wir mit $S(\mathfrak{B}_0, \varrho)$ die Entropie des auf \mathfrak{B}_0 beschränkten Zustandes ϱ . Die Beschränkung ϱ_0 von ϱ auf \mathfrak{B}_0 können wir nach dem bisherigen als eine „verallgemeinerte relative Spur“ von ϱ ansehen. $|\cdot|$

Betrachten wir nun wieder die Zerlegung (8.7) und die zugehörige Algebra \mathfrak{B}_1 , so ist der Zustandsraum von \mathfrak{B}_1 mit der Menge Ω_1 aller Dichtematrizen über \mathfrak{H}_1 isomorph. Daher gilt

$$S(\mathfrak{B}_1, \varrho) = -(\text{Tr. } \varrho_1 \ln \varrho_1)_1,$$

und wegen (8.12) folgern wir

$$S(\mathfrak{B}_1, \varrho) = S(\mathfrak{B}, \varrho^{\sigma_2}) - \ln \dim \mathfrak{H}_2. \quad (8.15)$$

Wir wollen nun eine Verallgemeinerung dieser Formel besprechen, die den Fall betrifft, daß

$$\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2 \otimes \mathfrak{H}_3 \quad (8.16)$$

ist. Setzen wir

$$\mathfrak{H}_i \otimes \mathfrak{H}_j = \mathfrak{H}_{ij} \quad (8.17)$$

und bezeichnen wir die identischen Abbildungen von \mathfrak{H}_i bzw. \mathfrak{H}_{ik} mit E_i bzw. E_{ik} . Sei weiter

$$\begin{aligned} \mathfrak{B}_{12} &= \{A_{12} \otimes E_3\}, \\ \mathfrak{B}_{23} &= \{E_1 \otimes A_{23}\}, \end{aligned} \quad (8.18)$$

$$\mathfrak{B}_2 = \{E_1 \otimes A_2 \otimes E_3\},$$

wobei A_{ik} alle linearen Abbildungen von \mathfrak{H}_{ik} in sich durchläuft.

A_k durchläuft analog die linearen Abbildungen von \mathfrak{H}_k in sich. Es ist

$$\mathfrak{B}_2 = \mathfrak{B}_{12} \cap \mathfrak{B}_{23}. \quad (8.19)$$

Betrachten wir ferner

$$G_{ik} = \{U \in \mathfrak{B}_{i_k}; U \text{ unitär}\} \quad (8.20)$$

$$G_j = \{U \in \mathfrak{B}_j; U \text{ unitär}\}.$$

Wie im Falle der Zerlegung (8.2) erhält man für jede Permutation ijk der Zahlen 1, 2, 3

$$A \in \mathfrak{B}_{i_k} \text{ ist äquivalent mit } A^{G_j} = A,$$

$$A \in \mathfrak{B}_j \text{ ist äquivalent mit } A^{G_{ik}} = A. \quad (8.21)$$

An Stelle von (8.15) tritt dann

$$S(\mathfrak{B}_{12}, \varrho) + S(\mathfrak{B}_{23}, \varrho) - S(\mathfrak{B}_2, \varrho) = S(\varrho^{G_3}) + S(\varrho^{G_1}) - S(\varrho^{G_{13}}), \quad (8.22)$$

denn beide Seiten unterscheiden sich um

$$\ln \dim \mathfrak{H}_3 + \ln \dim \mathfrak{H}_1 - \ln \dim \mathfrak{H}_{13} = 0.$$

An diese Betrachtung schließt sich folgende, wegen ihrer Konsequenzen wichtige, bisher aber nur für spezielle Fälle bewiesene Vermutung über die „starke Subadditivität der Entropie“ an:

Vermutung I (Lanford, Robinson [31])

Mit den Algebren (8.18) gilt

$$S(\mathfrak{B}, \varrho) + S(\mathfrak{B}_2, \varrho) \leq S(\mathfrak{B}_{12}, \varrho) + S(\mathfrak{B}_{23}, \varrho). \quad (8.23)$$

Den bisherigen Stand der Beweise findet man u. a. in [22], [24] und [25]. Wegen (8.22) und $S(\mathfrak{B}, \varrho) \equiv S(\varrho)$ können wir (8.23) auch schreiben

$$S(\varrho) + S(\varrho^{G_{13}}) \leq S(\varrho^{G_1}) + S(\varrho^{G_3}). \quad (8.24)$$

Ehe wir weiter bei dieser Formel verweilen, stellen wir noch einige Tatsachen zusammen:

Sei G eine kompakte Gruppe unitärer Operatoren. Wir setzen

$$\mathfrak{B}(G) = \{\text{lineare Hülle aller } U \in G\}. \quad (8.25)$$

$\mathfrak{B}(G)$ ist eine *-Unteralgebra von \mathfrak{B} und jede *-Unteralgebra von \mathfrak{B} , die das Einselement von \mathfrak{B} enthält, läßt sich so gewinnen. Mit \bar{G} bezeichnen wir dann die Gruppe

$$\bar{G} = \{\text{Gruppe der unitären Matrizen von } \mathfrak{B}(G)\}. \quad (8.26)$$

Offenbar ist stets $G \subseteq \bar{G}$. Die Gruppe \bar{G} heißt „die Vervollständigung von G “. Ist $G = \bar{G}$, so heißt G „vollständig“.

Lemma 8.4.

Ist \bar{G} die Vervollständigung von G , so ist stets

$$A^G = A^{\bar{G}}. \quad (8.27)$$

Beweis: Jedes $U \in \bar{G}$ ist eine Linearkombination von Elementen aus G und daher vertauscht A^G mit allen $U \in \bar{G}$.

Andererseits ist $A^G \succ^{\bar{G}} A$, da \bar{G} die Gruppe G enthält. (8.27) folgt daher aus Lemma 8.1. $|\equiv|$

Lemma 8.5.

Mit den Festlegungen (8.16), (8.18) und (8.20) gilt:

G_{ij} ist die Vervollständigung von $G_i \cdot G_j$.

Denn es besteht z.B. $G_1 \cdot G_2$ aus allen Matrizen $U_1 \otimes U_2 \otimes E_3$, und deren lineare Hülle ist \mathfrak{B}_{12} . $|\equiv|$

Lemma 8.6.

Sind G_1 und G_2 vollständige Gruppen unitärer Matrizen, so ist auch ihr Durchschnitt $G_1 \cap G_2$ vollständig.

Denn $G_1 \cap G_2$ besteht aus allen unitären Elementen der Algebra $\mathfrak{B}(G_1) \cap \mathfrak{B}(G_2)$. $|\equiv|$

Die folgende, etwas allgemeinere Vermutung läßt sich in wichtigen Spezialfällen analog zur Vermutung I behandeln:

Vermutung II

Seien G_1 und G_2 vollständige Gruppen unitärer Matrizen. G sei die von ihnen erzeugte vollständige Gruppe und G_0 ihr Durchschnitt.

Dann gilt

$$S(A^{G_0}) + S(A^G) \leq S(A^{G_1}) + S(A^{G_2}). \quad (8.28)$$

Lemma 8.7.

Gilt die Vermutung II, so auch die Vermutung I.

Beweis: Sei G_1 und G_3 wie in der Formel (8.20). Dann besteht der Durchschnitt von G_1 und G_3 nur aus Identität. Nach Lemma 8.5. ist ferner G_{13} die kleinste vollständige Gruppe, die G_1 und G_3 enthält. $|\equiv|$

8.4. Über die Vermutung von Lanford und Robinson

Wir wollen jetzt einige Gründe anführen, die die Vermutung II nahelegen. Wir betrachten die Ungleichung

$$\text{Tr. } A \ln B \leq \text{Tr. } A \ln A \quad \text{für} \quad \text{Tr. } A = \text{Tr. } B \quad (5.18)$$

und verwenden die in der Vermutung II benutzten Bezeichnungen.

Ersetzen wir A durch A^{G_0} und B durch

$$B = \beta \exp [\ln A^{G_1} + \ln A^{G_2} - \ln A^G], \quad (8.29)$$

wobei wir β durch

$$\text{Tr. } A = \text{Tr. } B \quad (8.30)$$

bestimmen. Wir haben dann

$$(\text{Tr. } A) \ln \beta + \text{Tr. } A \ln A^{G_1} + \text{Tr. } A \ln A^{G_2} \leq \text{Tr. } A \ln A^G + \text{Tr. } A \ln A.$$

Nun ist $\ln A^G$ mit den Elementen von G vertauschbar, und daher ist

$$\text{Tr. } A^{G_0} \ln A^G = \text{Tr. } A^G \ln A^G, \quad \text{da } G_0 \subseteq G.$$

Analoge Umformungen für die anderen Summanden ergeben

$$(\text{Tr. } A) \ln \beta + S(A^{G_0}) + S(A^G) \leq S(A^{G_1}) + S(A^{G_2}).$$

Daher gilt Vermutung II, wenn $\ln \beta \geq 0$ bzw. $\beta \geq 1$ ist.

Lemma 8.8.

Die Vermutung II ist für solche A richtig, für die

$$\text{Tr. } A \geq \text{Tr. exp} [\ln A^{G_1} + \ln A^{G_2} - \ln A^G] \quad (8.31)$$

gilt.

Der folgende Satz verallgemeinert ein Resultat von *Araki* und *Lieb* [22].

Satz 8.2.

Kommutieren irgend zwei der Matrizen A^{G_1} , A^{G_2} , A^G , so gilt die Vermutung II.

Beweis: Wir beschränken uns auf den Fall, daß A^{G_1} mit A^{G_2} kommutiert. Wegen der Ungleichung

$$\text{Tr. exp} (X + Y) \leq \text{Tr. (exp } X) (\text{exp } Y) \quad (8.32)$$

von *Golden* und *Thompson* [26, 37] ist

$$\text{Tr. exp} [\ln A^{G_1} + \ln A^{G_2} - \ln A^G] \leq \text{Tr. } A^{G_1} A^{G_2} (A^G)^{-1}. \quad (8.33)$$

Zu dieser Ungleichung wäre man auch gelangt, wenn zwei andere der fraglichen drei Matrizen kommutierten. Satz 8.2. folgt nun aus

Lemma 8.9.

Mit den Bezeichnungen der Vermutung II ist

$$\text{Tr. } A = \text{Tr. } A^{G_1} A^{G_2} (A^G)^{-1}. \quad (8.34)$$

Beweis: Da A^G mit allen U aus G vertauscht und G_1 , G_2 Untergruppen von G sind, haben die Matrizen

$$B(A^G)^{-1}, B^{G_1}(A^G)^{-1}, B^{G_2}(A^G)^{-1}$$

nach (8.4) die gleiche Spur. Setzen wir nacheinander für B

$$A^{G_1} A^{G_2}, (A^{G_1} A^{G_2})^{G_1}, ((A^{G_1} A^{G_2})^{G_1})^{G_2}, \dots,$$

was mit

$$A^{G_1} A^{G_2}, A^{G_1}(A^{G_2})^{G_1}, (A^{G_1})^{G_2}(A^{G_2})^{G_1}, ((A^{G_1})^{G_2})^{G_1} (A^{G_2})^{G_1}, \dots$$

gleichbedeutend ist. Nach Lemma 8.3. konvergiert diese Folge von Matrizen gegen $(A^{G_3})^2$, wobei G_3 die von G_1 und G_2 erzeugte Gruppe ist. Nach Lemma 8.4. ist aber $A^{G_3} = A^G$, und daher gilt (8.34). $|=|$

Die eben benutzte Beweistechnik führt auch auf die Formel

$$\text{Tr. } A^{G_1} A^{G_2} = \text{Tr. } (A^G)^2, \quad (8.35)$$

mit deren Hilfe man leicht

$$0 \leq \text{Tr. } (A^{G_0} + A^G - A^{G_1} - A^{G_2})^2 = \text{Tr. } (A^{G_0})^2 + (A^G)^2 - (A^{G_1})^2 - (A^{G_2})^2 \quad (8.36)$$

nachrechnet. Diese Ungleichung „approximiert“ die Vermutung II für Matrizen A , die nahe der Identität E liegen. $|\approx|$

Schließlich wollen wir noch eine Vermutung aussprechen, die wegen Satz 4.5. die Formel (8.31) für alle A zur Folge hätte und daher *schärfer als Vermutung II* ist:

Vermutung III

Sei X eine beliebige hermitesche Matrix. Im Gebiet $A \geq 0$ ist die Funktion

$$A \rightarrow \text{Tr. exp } (X + \ln A) \quad (8.37)$$

konkav.

Die Vermutung III ist wiederum schwächer als die leider nur für $j = 2$ bewiesene Konkavität [42] von

$$A \rightarrow \text{Tr. } (BA^t B)^j, \quad tj = 1 \quad (8.38)$$

und für alle $B > 0$,

deren Gültigkeit für eine unbeschränkte Folge von j -Werten die Richtigkeit der Vermutung III nach sich ziehen würde.

Literatur¹

- [22] Araki, H.; Lieb, E.H.: Univ. Kyoto Preprint RIMS-61, 1970.
- [23] Bargmann: Ann. Math. 59 (1954) 1.
- [24] Baumann, F.; Jost, R.: Problems of Theoretical Physics. Essays dedicated to N.N.Bogoljubov, Moskau 1970.
- [25] -: Diss. Zürich 1970 (Diss. Nr. 4503).
- [26] Golden, S.: Phys. Rev. 137 (1965) B 1127.
- [27] Jahnke, E.T.: Phys. Rev. 106 (1957) 620.
- [28] -: Phys. Rev. 108 (1957) 171.
- [29] -: Am. J. Phys. 33 (1965) 391.
- [30] Jost, R.: In „Quanta“, Univ. Chicago Press 1970.
- [31] Landford, O.E.; Robinson, D.W.: J. Math. Phys. 9 (1968) 1120.
- [32] Lassner, G.: Wiss. Z. Karl-Marx-Univ. Leipzig, Math.-Naturwiss. R. 22 (1973) 103.
- [33] Okubo, S.: Univ. Rochester-Preprint UR-875-326, 1970.
- [34] Robertson, B.: Phys. Rev. 144 (1966) 151.
- [35] Rockafellar, R.T.: Convex Analysis, Princeton Univ. Press 1970.
- [36] Зубарев, Д. И.; Калашиников: Теор. Мат. физ. 1 (1969) 137.
- [37] Thomson, C.: J. Math. Phys. 6 (1965) 1812.
- [38] Uhlmann, A.: Rep. Math. Phys. 1 (1970) 147.
- [39] -: Endlich-dimensionale Dichtematrizen I. Wiss. Z. Karl-Marx-Univ. Leipzig, Math.-Naturwiss. R. 21 (1972) 421.

¹ Die Literaturzitate [1] bis [21] finden sich in [39].

- [40] *Wehrl, A.*: Univ. Wien Preprint, 1972.
[41] *Wichmann, E.H.*: J. Math. Phys. 4 (1963) 884.
[42] *Wigner, E.P.*; *Yanase, M.M.*: Prod. Nat. Acad. Sc. 49 (1963) 910.
[43] *Влаги́миев, В. С.*: Методы теории функций многих комплексных переменных. Наука, Москва, 1964.

Zusammenfassung

Nachdem in Analogie zur Arbeit von *Laßner* [32] im Teil I [39] der allgemeine Zustandsraum definiert und seine geometrische Struktur angegeben wurde, betrachten wir im Teil II konkave Funktionale auf dem Zustandsraum und ihren Zusammenhang mit allgemeinen „Gleichgewichtslagen“. Der konventionelle Fall entsteht durch Auszeichnung eines bestimmten konkaven Funktionals, der Entropie. Im Sinne des axiomatischen Zugangs zur Quantenphysik betrachten wir Teilsysteme und Symmetrien physikalischer Systeme und kommen schließlich auf die in den letzten Jahren diskutierten und noch immer nicht vollständig bewiesenen Entropieungleichungen. Einige Ergebnisse werden erstmalig publiziert, jedoch überwiegt der zusammenfassend verallgemeinernde Charakter der Arbeit.

Schlüsselwörter: Quantentheorie – Statistische Physik – Entropie – Axiomatik

Ключи шифра: Квантовая теория – Статистическая физика – Энтропия – Аксиоматика

Key terms: Quantum theory – statistical physics – entropy – axiomatics

Mots-clefs: Théorie des quanta – physique statistique – entropie – axiomatique

Anschrift des Verfassers:
Prof. Dr. sc. nat. A. Uhlmann,
Sektion Physik, Karl-Marx-Universität,
DDR-701 Leipzig, Linnéstr. 5