

Ordnungsstrukturen im Raum der gemischten Zustände und die H-Theoreme von Felderhof-van Kampen¹

Von A. UHLMANN, Leipzig

1. Die Zahlen $e_s(\omega, \sigma)$

Sei

$$\omega = \{\omega^1, \omega^2, \dots\}$$

eine Wahrscheinlichkeitsverteilung, d. h.

$$\omega^j \geq 0, \quad \sum \omega^i = 1.$$

Wahrscheinlichkeitsverteilungen identifizieren wir mit den gemischten Zuständen gewisser physikalischer Systeme (z. B. „halb-klassische“ Systeme, Phasenräume mit „coarse graining“, Spin-Gitter-Systeme).

Sei ferner

$$\sigma = \{\sigma^1, \sigma^2, \dots\}$$

ein „Referenzmaß“, d. h. eine Folge positiver Zahlen

$$\sigma^j > 0, \quad j = 1, 2, \dots$$

die nicht normierbar zu sein braucht.

Das Referenzmaß wird später eine einfache physikalische Bedeutung erhalten. Es soll nämlich als eine stationäre Lösung einer master equation gewählt werden. (Man kann aber σ auch als ein Maß auffassen, das die Volumina einer Zelleinteilung des Phasenraumes determiniert.) *Die Invarianten, die wir aus ω und σ bilden werden, beschreiben, wie sich die Lösungen der master equation dieser stationären Lösung nähern bzw. von dieser stationären Lösung „angezogen“ werden.*

Wir wollen nun annehmen, daß wir die Numerierung so gewählt haben, daß

$$\frac{\omega^1}{\sigma^1} \geq \frac{\omega^2}{\sigma^2} \geq \dots \tag{1}$$

ist. Für den Fall

$$\frac{\omega^j}{\sigma^j} = \frac{\omega^{j+1}}{\sigma^{j+1}} \quad \text{soll stets} \quad \omega^j \geq \omega^{j+1} \tag{2}$$

folgen. Für unendliche Folgen ist freilich eine solche Anordnung nicht immer erreichbar. Wir gehen bald zu einer von dieser „Ordnungsannahme“ freien Behandlung über.

¹ Die Arbeit entstand im Rahmen des Naturwissenschaftlich-Theoretischen Zentrums (NTZ) der Karl-Marx-Universität Leipzig.

Unter der Annahme (1) und (2) definieren wir die Zahlen

$$e_s(\omega, \sigma)$$

wie folgt. Ist

$$s = \sigma^1 + \sigma^2 + \dots + \sigma^m + \vartheta\sigma^{m+1}, \quad 0 \leq \vartheta \leq 1, \quad (3a)$$

so setzen wir

$$e_s(\omega, \sigma) = \omega^1 + \dots + \omega^m + \vartheta\omega^{m+1}. \quad (3b)$$

Ist jedoch

$$\sum \sigma_j < \infty \quad \text{und} \quad s \geq \sum \sigma^j, \quad (4a)$$

so setzen wir

$$e_s(\omega, \sigma) = 1. \quad (4b)$$

Nun versuchen wir die Definition der Zahlen e_s so zu formulieren, daß die Ordnungsannahme (1) und (2) in ihr nicht mehr auftritt. Hierzu betrachten wir Zahlenfolgen

$$t = \{t_1, t_2, t_3, \dots\} \quad \text{mit} \quad 0 \leq t_j \leq 1 \quad (5)$$

und schreiben

$$T_s$$

für die Menge aller derjenigen Folgen t , für die neben (5) noch

$$\sum t_j \sigma^j \leq s \quad (6)$$

gilt. Eine Zahlenfolge t liegt also genau dann in T_s , wenn (5) und (6) erfüllt sind.

Wir behaupten nun

$$e_s(\omega, \sigma) = \sup_{t \in T_s} \sum \omega^j t_j. \quad (7)$$

Man beachte: (7) ist eine *Definition*, wenn sich ω, σ nicht, wie unter (1) und (2) angegeben, ordnen lassen. Lassen sich aber ω, σ gemäß (1) und (2) ordnen, so muß die Übereinstimmung von (3) mit (7) *bewiesen* werden.

Bemerkung: Es ist zweckmäßig, $t = \{t_1, t_2, \dots\}$ als eine Observable aufzufassen, die dem „reinen Zustand“ j den Meßwert t_j zuordnet. Dann ist $\sum \omega^j t_j$ der Erwartungswert der Observablen t im Zustand ω .

Wir beenden Abschnitt 1 mit einem Beweis von (7) beim Erfülltsein der Ordnungsannahme (1) und (2).

/=/ Beweis von (7) bei Gültigkeit von (1) und (2): Ist $\infty > s \geq \sum \sigma_j$, so setzen wir $t_j = 1$ für alle j und erhalten aus (7) $e_s = \sum \omega^j = 1$.

Sei nun s nach (3a) gegeben. Dann ist wegen (1)

$$\sum t_j \omega^j = \sum_{j=1}^{m+1} t_j \omega^j + \sum_{m+2}^{\infty} \frac{\omega^j}{\sigma^j} t_j \sigma^j \leq \sum_1^{m+1} t_j \omega^j + \frac{\omega^{m+1}}{\sigma^{m+1}} \sum_{m+2}^{\infty} t_j \sigma^j.$$

Aus (6) und (3a) folgt jetzt

$$\sum t_j \omega^j \leq \sum_1^{m+1} t_j \omega^j + \frac{\omega^{m+1}}{\sigma^{m+1}} \left\{ (\vartheta - t_{m+1}) \sigma^{m+1} + \sum_1^m (\sigma^j - t_j \sigma^j) \right\}.$$

Die rechte Seite dieser Ungleichung schreibt sich

$$\sum_1^m \sigma^j (1 - t_j) \left(\frac{\omega^{m+1}}{\sigma^{m+1}} - \frac{\omega^j}{\sigma^j} \right) + \sum_1^m \omega^j + t_{m+1} \omega^{m+1} + (\vartheta - t_{m+1}) \omega^{m+1}.$$

Wegen

$$1 - t_i \geq 0, \quad \frac{\omega^{m+1}}{\sigma^{m+1}} - \frac{\omega^j}{\sigma^j} \leq 0 \quad \text{für } j \leq m$$

folgt

$$\sum t_j \omega^j \leq \sum_1^m \omega^j + \vartheta \omega^{m+1}.$$

Das Gleichheitszeichen wird offenbar für den speziellen Fall

$$t' : t'_1 = \dots = t'_m = 1, \quad t'_{m+1} = \vartheta, \quad t'_j = 0 \quad \text{sonst}$$

angenommen. Diese Folge liegt in T_s . \neq

2. Veranschaulichung der e -Zahlen

Was bedeuten die Zahlen e_s für eine Wahrscheinlichkeitsverteilung?
Betrachten wir zwei einfache Beispiele.

Fall 1: $\sigma^1 = \sigma^2 = \dots = \sigma^m = 1$, $m = 6$.

Ist ω^i , $i = 1, 2, \dots, 6$ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung, so ordnen wir sie zunächst der Größe nach (Abb. 1). Dies entspricht der Ordnungsannahme (1), (2).

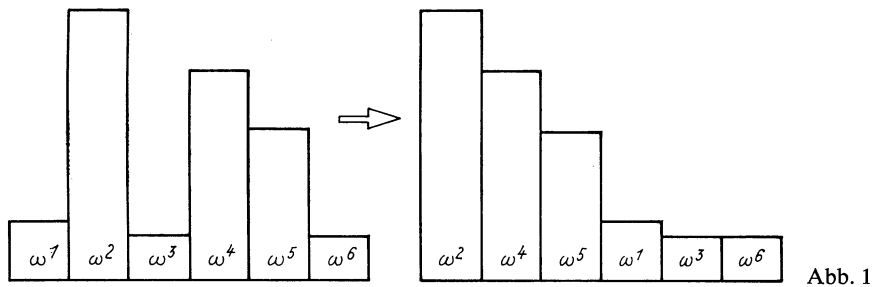


Abb. 1

Dann ist z. B. e_3 proportional der Fläche der ersten drei Segmente der rechts stehenden geordneten Verteilung. Auf diese Weise erhalten wir leicht $e_0 = 0$, e_1, e_2, \dots, e_m . Liegt dann s zwischen den ganzen Zahlen j und $j + 1$, so ist e_s durch lineare Interpolation zwischen e_j und e_{j+1} bestimmt. In unserem Fall enthalten also die e_i mit $i = 1, 2, \dots, 6$ bereits alle in den e -Zahlen steckenden Informationen.

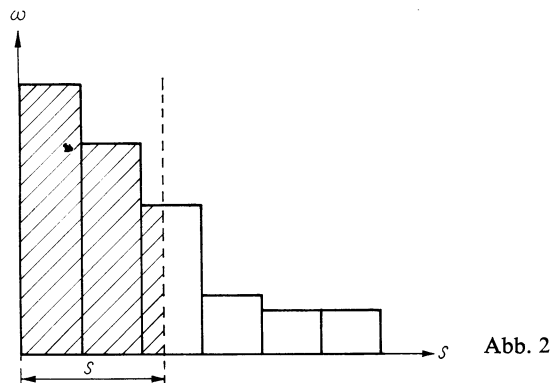
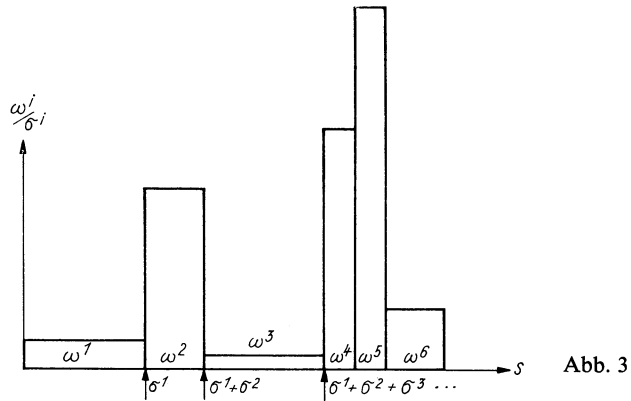


Abb. 2

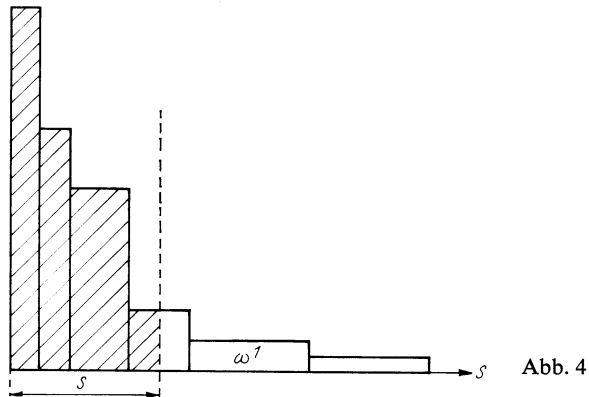
Somit sind die e_s Flächen proportional, die in Abb. 2 durch Schraffierung angedeutet sind. Der Proportionalitätsfaktor wird durch die Forderung bestimmt, daß die Gesamtfläche, die von der Verteilung eingenommen wird, gleich Eins sein muß.

Fall 2: Hier sei $\sigma = \{2, 1, 2, 0.5, 0.5, 1\}$ und die ω^j seien proportional $\{1, 3, 0.5, 2, 2, 3, 1\}$.

Wir tragen nach oben ω^i/σ^i ab und markieren auf der s -Achse die Punkte $\sigma^1, \sigma^1 + \sigma^2, \sigma^1 + \sigma^2 + \sigma^3, \dots$, so daß die erhaltenen Segmente bei geeigneter Wahl der Flächeneinheit gleich den Wahrscheinlichkeiten $\omega^1, \omega^2, \omega^3, \dots$ werden (Abb. 3).



Nun permutieren wir die Flächen so, daß die Ordnungsannahme (1), (2) erfüllt ist. Dann können wir die Zahlen $e_s(\omega, \sigma)$ ablesen. Ein Beispiel hierfür ist die schraffiert gezeichnete Fläche in Abb. 4.



3. Die Relation $\omega \overset{\sigma}{\succ} \varrho$

Sei σ ein gegebenes Referenzmaß.

Wir betrachten zwei Wahrscheinlichkeitsverteilungen ω und ϱ . Wir schreiben

$$\omega \overset{\sigma}{\succ} \varrho \tag{8}$$

und sagen, ω sei σ -gemischter als ϱ , wenn für alle $s \geq 0$

$$e_s(\omega, \sigma) \leq e_s(\varrho, \sigma) \quad (9)$$

ist. Anstelle von „ σ -gemischter als“ kann man auch „ σ -chaotischer als“ sagen.

Ist sowohl $\omega \succ^\sigma \varrho$ als auch $\varrho \succ^\sigma \omega$, so heißen ω und ϱ σ -äquivalent, und wir schreiben dann auch

$$\omega \sim^\sigma \varrho.$$

Die Gesamtheit der Beziehungen, die durch \succ^σ in der Menge aller Zustände (d. h. hier: in der Menge aller Wahrscheinlichkeitsverteilungen des betrachteten Typs) entsteht, wird auch als σ -Ordnungsstruktur des Zustandsraumes bezeichnet. (Als Zustandsraum bezeichnen wir immer den Raum aller gemischten Zustände. Die reinen Zustände bilden den extremen Rand des Zustandsraumes, der aus den δ -artigen Wahrscheinlichkeitsmaßen besteht.)

Wie leicht zu sehen ist, folgt aus

$$\omega_3 \succ^\sigma \omega_2, \quad \omega_2 \succ^\sigma \omega_1$$

stets

$$\omega_3 \succ^\sigma \omega_1. \quad (10)$$

Wir zeigen nun den wichtigen

Satz 1

Sei mit einer stochastischen Matrix T

$$\omega^i = \sum_j T_j^i \varrho^j \quad (11)$$

und

$$\sigma^i = \sum_j T_j^i \sigma^j. \quad (12)$$

Dann gilt

$$\omega \succ^\sigma \varrho. \quad (13)$$

Wir erinnern daran, daß T stochastisch heißt, wenn

$$T_j^i \geq 0 \quad \text{für alle } i, j$$

und

$$\sum_i T_j^i = 1 \quad \text{für alle } j$$

gilt. Schreiben wir abkürzend

$$\omega = T\varrho, \quad \sigma = T\sigma$$

für (11) und (12), so können wir *Satz 1* auch wie folgt formulieren:

Für jede stochastische Matrix T , für die $T\sigma = \sigma$ gilt, ist $T\varrho \succ^\sigma \varrho$ für alle ϱ .

Satz 1 interpretieren wir so: Eine stochastische Matrix T bewirkt im allgemeinen eine „Dissipation“, eine „Strukturverminderung“, eine „Verwaschung“ der Wahrscheinlichkeitsverteilung. Das Ungleichungssystem (9) gibt einer solchen heuristischen Be-

trachtung einen genauen Sinn. Es zeigt, wie nach Abschnitt 2 auch geometrisch ablesbar, in welchem Sinne ω „verwaschener“, „undifferenzierter“ als ϱ ist, wenn $\omega \succ_{\sigma} \varrho$ gilt.

Nach Satz 1 gibt eine stochastische Abbildung Anlaß zu einer solchen Situation.

Satz 1 ist ein Spezialfall der folgenden Behauptung:

Satz 2

Für jedes $s \geq 0$ und jede stochastische Matrix T gilt die Ungleichung

$$e_s(\omega, \sigma) \geq e_s(T\omega, T\sigma). \quad (14)$$

Wegen der Definition der σ -Ordnungsstruktur erhalten wir die Behauptung des Satzes 1 aus (14) mit $T\sigma = \sigma$.

/=| *Beweis von Satz 2:* Sei R_s die Menge aller Folgen

$$t: \sum t_j (T\sigma)^j \leq s, \quad 0 \leq t_i \leq 1.$$

Dann ist $e_s(T\omega, T\sigma)$ das Supremum über R_s der Zahlen

$$\xi(t) := \sum_j (T\omega)^j t_j = \sum_{i,j} t_j T_i^j \omega^i = \sum_i \tilde{t}_i \omega^i,$$

wobei wir

$$\tilde{t}_i = \sum_j T_i^j t_j$$

gesetzt haben. Nun ist aber

$$\sum \tilde{t}_i \sigma^i = \sum t_j T_i^j \sigma^i = \sum t_j (T\sigma)^j \leq s.$$

Nach Definition (7) ist daher

$$e_s(\omega, \sigma) \geq \sum \tilde{t}_i \omega^i = \xi(t).$$

Durchläuft nun unter Bildung des Supremums t ganz R_s , so erhalten wir Ungleichung (14). /=|

4. Zusammenhang mit der master equation

Die Erörterungen des vorangegangenen Abschnittes sind direkt auf Markoffsche M-Gleichungen (master equations) anwendbar.

Sei

$$\frac{d}{dt} \omega = L\omega, \quad (15)$$

wobei L eine Matrix (linearer Operator) mit

$$\sum_i L_j^i = 0 \quad \text{und}$$

$$L_i^i \leq 0 \quad \text{und} \quad L_k^i \geq 0 \quad \text{für} \quad i \neq k$$

ist. Für die Matrizen

$$M(t) = \exp(tL) \quad (16)$$

gilt

$$M(0) = 1, \quad M(t_1 + t_2) = M(t_1) M(t_2). \quad (16a)$$

Darüber hinaus aber ist $M(t)$ für alle $t \geq 0$ stochastisch.

Satz 3

Sind für $t \geq 0$

$$\begin{aligned} t \rightarrow \omega_t &= M(t) \omega_0 \\ t \rightarrow \varrho_t &= M(t) \varrho_0 \end{aligned} \quad (17a)$$

Lösungen der master equation (15) und sind ω_0, ϱ_0 Wahrscheinlichkeitsverteilungen, so gilt

$$e_s(\omega_{t_2}, \varrho_{t_2}) \leq e_s(\omega_{t_1}, \varrho_{t_1}) \quad \text{für } t_2 \geq t_1 \quad (17b)$$

und alle $s \geq 0$.

Dies folgt unmittelbar aus Satz 2, da $M(t_2 - t_1)$ stochastisch ist und z. B.

$$\omega_{t_2} = M(t_2 - t_1) \omega_{t_1}$$

gilt.

Nicht weniger einfach beweist man den nachstehenden Satz.

Satz 4

Ist $L\sigma = 0$ für ein Referenzmaß σ bzw., was dasselbe ist, $M(t)\sigma = \sigma$ für $t \geq 0$, so gilt für jede Lösung

$$t \rightarrow \omega_t, \quad t \geq 0, \quad (18a)$$

die ganz im Zustandsraum verläuft,

$$\omega_{t_2} \overset{\sigma}{>} \omega_{t_1} \quad \text{für alle } t_2 \geq t_1. \quad (18b)$$

Wir bemerken zu obiger Formulierung: Wenn ω_t für $t = 0$ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung ist, so gilt dies auch für alle $t > 0$; denn wenn eine Lösungskurve der master equation den Zustandsraum zu einem Zeitpunkt berührt, so verläuft sie hiernach vollständig im Zustandsraum.

Zum *Beweis* von Satz 4 benötigt man nur Satz 2 und die Tatsache, daß für $t \geq 0$ jede der Matrizen $M(t)$ an die Stelle der Matrix T in Satz 1 treten kann.

Diese Erörterungen legen nahe, Prozesse

$$t \rightarrow \omega_t, \quad t \geq 0. \quad (19)$$

die jedem Zeitpunkt $t \geq 0$ einen Zustand (d. h. eine diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilung) ω_t zuordnen, mit Hilfe der σ -Ordnungsstruktur zu klassifizieren. Für das Folgende muß (19) nicht notwendigerweise Lösung einer master equation sein.

Wir nennen einen Prozeß (19) genau dann einen σ -konkaven Prozeß, wenn er bezüglich der σ -Ordnungsstruktur gerichtet ist, d. h., wenn

$$\omega_{t_2} \overset{\sigma}{>} \omega_{t_1} \quad \text{für alle } t_2 \geq t_1 \quad (20)$$

gilt.

Ein σ -konkaver Prozeß ist daher dadurch gekennzeichnet, daß für alle $s \geq 0$ die Funktionen

$$t \rightarrow e_s(\omega_t, \sigma) \quad (21)$$

monoton fallen.

Aus unseren Erörterungen ist zu sehen, daß alle im Zustandsraum verlaufenden Lösungen einer (Markoffschen) master equation, die σ zum Fixpunkt hat, σ -konkave Prozesse sind.

5. Die H-Theoreme von Felderhof und van Kampen

Sei $g = g(x)$ eine für $x \geq 0$ stetige und konkave Funktion mit $g(0) = 0$. Konkavität bedeutet, daß für alle $x_j \geq 0$ und alle $p_j \geq 0$ mit $\sum p_i = 1$ die Ungleichung

$$g\left(\sum_i p_i x_i\right) \geq \sum p_i g(x_i)$$

besteht.

Das für die Physik sicherlich wichtigste Beispiel einer solchen Funktion ist $h(x) = -x \ln x$. Auch die Funktionen $g = x^r$ mit $0 < r \leq 1$ und $g = -x^r$ mit $1 \leq r$ sind konkav und verschwinden für $x = 0$. Übrigens ist g genau dann konkav, wenn die zweite Ableitung (im distributionstheoretischen Sinn) nicht positiv ist: $g'' \leq 0$.

Nun führen wir die Funktionale

$$G(\omega, \sigma) = \sum \sigma^j g(\omega^j / \sigma^j) \quad (22)$$

ein, wobei g eine beliebige konkave, stetige und im Punkt $x = 0$ verschwindende Funktion ist. ω muß nicht notwendigerweise normiert, ja nicht einmal normierbar sein. Wir sagen, G existiere für gegebenes ω und σ , wenn die in (22) rechts stehende Reihe absolut konvergiert oder bestimmt divergiert. Falls z. B. $\sigma^1 = 0$ ist, wird

$$\sigma^1 g(\omega^1 / \sigma^1) := \inf_{\bar{\sigma} > 0} \bar{\sigma} g(\omega^1 / \bar{\sigma})$$

definiert.

Die Funktionale (22) wollen wir abkürzend *Felderhofsche Funktionale* oder kurz *F-Funktionale* nennen. Für (22) sagen wir auch, G sei das durch g bestimmte *F-Funktional*.

Die Funktionale G haben mehrere wichtige Eigenschaften, die unabhängig von der Wahl der zu ihrer Definition benutzten konkaven Funktion g sind. Einen Teil dieser Eigenschaften betrachten wir hier und einen anderen im nächsten Abschnitt.

Zunächst sieht man sofort, daß

$$G(r\omega, r\sigma) = rG(\omega, \sigma) \quad \text{für } r > 0 \quad (23)$$

ist. Interessant aber ist

Satz 5

Sei M eine stochastische Matrix. Dann ist

$$G(M\omega, M\sigma) \geq G(\omega, \sigma) \quad (24)$$

für jedes Felderhof-Funktional G .

(Die Existenz der in (24) auftretenden Größen wird vorausgesetzt.)

Nun aber ergibt sich sofort

Satz 6

(Felderhof-van Kampensche H-Theoreme): Sei $t \rightarrow \omega_t$ eine Lösung der master equation $\dot{\omega} = L\omega$, die ganz im Zustandsraum verläuft. Sei $L\sigma = 0$. Dann ist für jedes *F-Funktional*

$$t \rightarrow G(\omega_t, \sigma) \quad (25)$$

monoton wachsend.

Für $t_2 \geq t_1$ ist nämlich die in (16) eingeführte Matrix stochastisch und läßt σ invariant. Wegen $M(t_2 - t_1)\omega_{t_1} = \omega_{t_2}$ folgt daher Satz 6 aus Satz 5. /=/

Wir müssen daher noch Satz 5 beweisen. Es wird sich zeigen, daß dieser Beweis noch auf eine andere wichtige Eigenschaft der *F-Funktionale* führt. Man findet nämlich

Satz 7

Seien $\omega, \omega_1, \omega_2, \dots$ und $\sigma, \sigma_1, \sigma_2, \dots$ Verteilungen, für die

$$\omega = \sum_i \omega_i \quad \text{und} \quad \sigma = \sum_i \sigma_i \quad (26)$$

gilt. (Genauer: Für jeden Index j ist

$$\omega^j = \sum_i \omega_i^j \quad \text{und} \quad \sigma^j = \sum_i \sigma_i^j$$

und überdies gilt stets $\omega_i^j \geq 0, \sigma_i^j \geq 0$.) Dann ist

$$G(\omega, \sigma) \geq \sum G(\omega_i, \sigma_i). \quad (27)$$

Wegen (23) ist diese Behauptung mit der simultanen Konkavität der F -Funktionale in beiden Argumenten äquivalent.

Wie bereits erwähnt, haben die Sätze 5 und 7 eine gemeinsame Wurzel, die im nachstehenden Lemma zutage tritt.

Lemma

Sind $s_i \geq 0, t_i \geq 0$ Zahlen, deren Summe konvergiert,

$$s = \sum s_i, \quad t = \sum t_i, \quad (28a)$$

so gilt die Abschätzung

$$tg(s/t) \geq \sum t_i g(s_i/t_i) \quad (28b)$$

für jede für $x \geq 0$ konkave Funktion $g = g(x)$.

|=| *Beweis von Satz 5:* Es ist für festes j

$$(M\omega)^j = \sum_i M_i^j \omega_i^j, \quad (M\sigma)^j = \sum_i M_i^j \sigma_i^j.$$

Nach obigem Lemma ist daher, wenn wir $s_i = M_i^j \omega_i^j, t_i = M_i^j \sigma_i^j$ setzen,

$$\begin{aligned} (M\sigma)^j g((M\omega)^j/(M\sigma)^j) &\geq \sum_i (M_i^j \sigma_i^j) g(M_i^j \omega_i^j / M_i^j \sigma_i^j) \\ &\geq \sum_i M_i^j \sigma_i^j g(\omega_i^j / \sigma_i^j). \end{aligned}$$

Daher folgt

$$G(M\omega, M\sigma) \geq \sum_{i,j} M_i^j \sigma_i^j g(\omega_i^j / \sigma_i^j).$$

Wegen der Stochastizität von M ist $\sum_j M_i^j = 1$, und somit ist Ungleichung (24) bewiesen. |=|

|=| Der *Beweis von Satz 7* ist noch einfacher. Nach Definition ist

$$G(\omega, \sigma) = \sum \sigma^j g(\omega^j / \sigma^j).$$

Nun ist aber für jedes feste j $\omega^j = \sum_i \omega_i^j, \sigma^j = \sum_i \sigma_i^j$, so daß wir auf jeden Term der rechten Seite unser Lemma anwenden können. Also

$$G(\omega, \sigma) \geq \sum_{i,j} \sigma_i^j g(\omega_i^j / \sigma_i^j) = \sum_i G(\omega_i, \sigma_i).$$

Dies war zu beweisen. |=|

|=| *Beweis des Lemmas:* Wir zeigen

$$g(s/t) \geq \sum (t_i/t) g(s_i/t_i).$$

Offenbar ist die Summe der t_i/t gleich Eins. Für beliebige $x_i \geq 0$ folgt daher aus der Konkavität

$$g(\sum t_i x_i/t) \geq \sum (t_i/t) g(x_i).$$

Nun brauchen wir nur noch $x_i = s_i/t_i$ zu setzen. |=|

Nun sind wir an folgendem Resultat angelangt:

Ist $t \rightarrow \omega_t$, $t \geq 0$, eine im Zustandsraum verlaufende Lösung der master equation, ist ferner die Verteilung σ eine stationäre Lösung dieser master equation, so gilt:

- I) $t \rightarrow \omega_t$ ist ein σ -konkaver Prozeß
- II) Es gelten die Felderhof-van Kampenschen H -Theoreme.

Sind diese beiden Aussagen äquivalent?

Dieses Problem stellt sich wie folgt dar:

Sei $t \rightarrow \omega_t$ irgendein Prozeß. Zieht eine der beiden Aussagen

$$\text{I) } \omega_{t_2} \stackrel{\sigma}{>} \omega_{t_1} \text{ für alle } t_2 \geq t_1 \geq 0$$

und

II) für alle Felderhofschen Funktionale wächst $G(\omega_t, \sigma)$ monoton die andere nach sich?

Dieser Frage wollen wir uns nun zuwenden und vorher noch bemerken, daß es sich bei den Felderhofschen Funktionalen und den Funktionalen $e_s(\omega, \sigma)$ um recht verschiedene Funktionalklassen handelt. Das sieht man, wenn man die Homogenitätsgleichung (23) mit den Beziehungen ($r > 0$)

$$e_s(\omega, r\sigma) = e_{rs}(\omega, \sigma), \quad e_s(r\omega, \sigma) = r e_s(\omega, \sigma). \quad (29)$$

vergleicht.

6. Ordnungsstruktur und Felderhof-van Kampensche H -Theoreme

Wir wollen nun die am Ende des vergangenen Abschnittes aufgeworfene Frage bejahend beantworten. Wir wollen also zeigen:

Satz 8

Genau dann ist

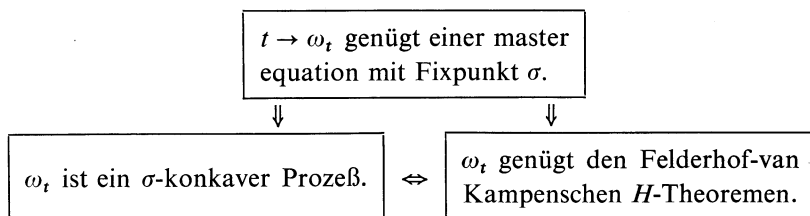
$$t \rightarrow \omega_t, \quad t \geq 0$$

ein σ -konkaver Prozeß, wenn für jedes F -Funktional G die Funktion

$$t \rightarrow G(\omega_t, \sigma), \quad t \geq 0$$

monoton wächst.

Hierbei ist es schon nicht mehr erforderlich, daß $t \rightarrow \omega_t$ einer master Gleichung genügt. Wir haben vielmehr folgende wichtige logische Verkettung:



Satz 8 ist Folge eines etwas allgemeineren Sachverhaltes.

Satz 9

Genau dann gilt

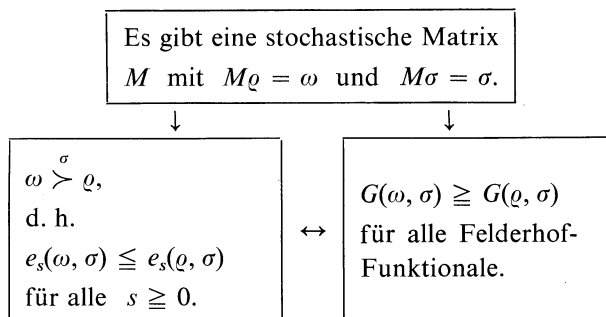
$$\omega \succ_{\sigma} \varrho,$$

wenn für jedes Felderhofsche Funktional G

$$G(\omega, \sigma) \geq G(\varrho, \sigma)$$

gilt.

Satz 9 ist einfacher in seiner Struktur als Satz 8 und auch für diskrete Prozesse anwendbar. Aus ihm folgt Satz 8. Er bedingt folgende logische Verkettung:



Der Beweis erfordert eine Reihe von Schritten, denen wir uns jetzt zuwenden.

Schritt 1: Wir führen die Zahlen

$$\hat{e}_s(\omega, \sigma) = \sum_{\frac{\omega^j}{\sigma^j} \geq s} \omega^j - s\sigma^j \tag{30}$$

ein. Wir summieren also rechts über alle diejenigen Indizes j , für welche $\omega^j \geq s\sigma^j$ gilt.

Ist $\omega \succ_{\sigma} \varrho$, so gilt

$$\hat{e}_s(\omega, \sigma) \leq \hat{e}_s(\varrho, \sigma) \text{ für alle } s \geq 0. \tag{31}$$

Zum Beweis drücken wir die \hat{e}_s durch die e_s aus:

Ist $0 \leq t_j \leq 1$ eine beliebige Zahlenfolge, so ist

$$\hat{e}_s(\omega, \sigma) \geq \sum_j (\omega^j - s\sigma^j) t_j. \tag{32}$$

Denn ist $1 > t_j$ für ein j mit $\omega^j \geq s\sigma^j$, so ist der entsprechende Term links größer als rechts. Ist aber $t_j > 0$ für ein j mit $\omega^j < s\sigma^j$, so ergibt sich auf der rechten Seite ein

negativer Beitrag. Hieraus sieht man die Gültigkeit von (32). Andererseits entsteht in (32) Gleichheit, wenn $t_j = 1$ für $\omega^j \geq s\sigma^j$ und $t_j = 0$ sonst gesetzt wird.

Daher ist

$$\hat{e}_s(\omega, \sigma) = \sup \sum_j (\omega^j - s\sigma^j) t_j, \quad 0 \leq t_i \leq 1.$$

Setzen wir

$$\sum \sigma^j t_j = r,$$

so entsteht hieraus

$$\hat{e}_s(\omega, \sigma) = \sup_r \sup \left(\sum_j \omega^j t_j - sr \right),$$

wobei das zweite Supremum nur noch über die Folgen $\{t_j\}$ mit $\sum \sigma^j t_j = r$ zu nehmen ist. Das heißt aber

$$\hat{e}_s(\omega, \sigma) = \sup_{r \geq 0} \{e_r(\omega, \sigma) - sr\}. \quad (33)$$

Aus dieser wichtigen Formel folgt die zu beweisende Behauptung; denn aus $e_r(\omega, \sigma) \leq e_r(\rho, \sigma)$ für alle r folgt wegen (33) das Ungleichungssystem (31).

Schritt 2: Das Funktional \hat{e}_s ist bis auf das Vorzeichen ein spezielles F -Funktional. Sei nämlich g_s wie folgt definiert:

$$g_s(x) = 0 \quad \text{für} \quad 0 \leq x \leq s, \quad (34)$$

$$g_s(x) = (s - x) \quad \text{für} \quad x \geq s.$$

Sei G_s das mit Hilfe von g_s konstruierte Felderhofsche Funktional. Dann ist wegen (34)

$$G_s(\omega, \sigma) = -\hat{e}_s(\omega, \sigma). \quad (35)$$

Somit folgt aus $\omega \succ_{\sigma} \rho$ die Ungleichung $G(\omega, \sigma) \geq G(\rho, \sigma)$, da wir jede für $0 \leq x$ stetige und konkave Funktion g durch eine Linearkombination der g_s mit positiven Koeffizienten und einer linearen Funktion beliebig genau approximieren können. Hierzu können wir Polygonzüge benutzen, deren Eckpunkte auf der Kurve $y = g(x)$ liegen.

Hierzu geben wir eine Folge reeller Zahlen

$$x_0 = 0 < x_1 < x_2 < \dots$$

vor, die bestimmt gegen Unendlich divergiert.

Für $x_j \leq x \leq x_{j+1}$ setzen wir

$$\bar{g}(x) = g(x_j) + \frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j} \{g(x_{j+1}) - g(x_j)\}. \quad (36)$$

\bar{g} ist eine konkave Funktion, für die $g \geq \bar{g}$ gilt. Wegen der Stetigkeit von g können wir die Punkte x_j so wählen, daß mit vorgegebenem $\varepsilon_j > 0$

$$|g(x) - \bar{g}(x)| < \varepsilon_j \quad \text{für} \quad x_j \leq x \leq x_{j+1} \quad (37)$$

gilt. Daher müssen wir die fraglichen Ungleichungen nur für Felderhofsche Funktionale zeigen, die aus solchen Funktionen \bar{g} gebildet werden.

Die Ableitung \bar{g} ist offenbar stückweise konstant, und sie springt an der Stelle x_j um den Wert

$$\delta_j = \left\{ \frac{g(x_{j+1}) - g(x_j)}{x_{j+1} - x_j} - \frac{g(x_j) - g(x_{j-1})}{x_j - x_{j-1}} \right\} x_j.$$

Die Konkavität von g impliziert, daß δ_j nicht-positiv ist:

$$\delta_j \leq 0.$$

Betrachten wir nun die Reihe

$$\tilde{g}(x) = \sum |\delta_j| g_{x_j}(x). \quad (38)$$

Diese Reihe konvergiert trivialerweise auf jedem endlichen Intervall gleichmäßig, da g_s für $s' \leq s$ verschwindet und die x_j keinen Häufungspunkt im Endlichen besitzen. Nach Konstruktion haben \bar{g} und \tilde{g} dieselben Sprungstellen, und daher ist $(\bar{g} - \tilde{g})'$ konstant. Also ist

$$\bar{g} = \tilde{g} + ax + b. \quad (39)$$

Setzen wir noch $g(0) = 0$ voraus, so ist $b = 0$.

Diese Konstruktion zeigt, daß aus

$$G_s(\omega, \sigma) \geq G_s(\varrho, \sigma)$$

für alle s die Ungleichung

$$G(\omega, \sigma) \geq G(\varrho, \sigma) \quad (40)$$

für jedes F -Funktional folgt, wenn immer diese definiert und endlich sind.

Somit ist gezeigt, daß aus $\omega \succ_{\sigma} \varrho$ stets (40) folgt.

Es verbleibt, die Umkehrung dieses Sachverhaltes zu beweisen. Dies geschieht nun.

Schritt 3: Es langt zu zeigen, daß aus dem Ungleichungssystem

$$\hat{e}_s(\omega, \sigma) \leq \hat{e}_s(\varrho, \sigma); \quad s \geq 0$$

das Ungleichungssystem

$$e_s(\omega, \sigma) \leq e_s(\varrho, \sigma); \quad s \geq 0$$

folgt; denn nach (35) ist \hat{e}_s bis auf das Vorzeichen ein Felderhofsches Funktional. Dies ist offensichtlich erreicht, wenn wir die zu (33) gehörende *Umkehrformel*

$$e_s(\omega, \sigma) = \inf_{r \geq 0} \{ \hat{e}_r(\omega, \sigma) + rs \} \quad (41)$$

beweisen können.

Wegen (33) ist $e_s(\omega, \sigma)$ jedenfalls nicht größer als die rechte Seite von (41). Daher ist nur noch zu beweisen, daß $e_s(\omega, \sigma)$ bei geeigneter Wahl von r durch Zahlen der Form $\hat{e}_r + rs$ approximiert werden kann. Dies zeigen wir als nächstes für spezielle Zustände und danach durch ein Stetigkeitsargument allgemein.

Sei N die Menge derjenigen Zustände ω , für die gilt:

- a) Nur endlich viele der ω^j sind von Null verschieden.
- b) Die Zahlen ω^j/σ^j für Indizes j mit $\omega^j \neq 0$ sind alle voneinander verschieden.

Für ein solches $\omega \in N$ wählen wir zunächst die Numerierung so, daß

$$\frac{\omega^1}{\sigma^1} > \frac{\omega^2}{\sigma^2} > \dots > \frac{\omega^n}{\sigma^n}, \quad \omega^j = 0 \quad \text{für } j > n$$

gilt und betrachten ein s mit $0 \leq s \leq \sigma^1 + \dots + \sigma^n$. (Für größere s ist nämlich (41) trivial mit $r = 0$ erfüllt.) Dann gibt es mit einem m , $m \leq n$, eine Darstellung

$$s = \sigma^1 + \dots + \sigma^m + \vartheta \sigma^{m+1}, \quad 0 \leq \vartheta < 1$$

und nach (30) ist

$$\hat{e}_r(\omega, \sigma) = \omega^1 + \dots + \omega^{m+1} - r(\sigma^1 + \dots + \sigma^{m+1}) \quad \text{für } r = \frac{\omega^{m+1}}{\sigma^{m+1}}$$

und daher

$$\hat{e}_r + rs = \omega^1 + \dots + \omega^m + \vartheta\omega^{m+1}.$$

Infolge unserer Ordnungsannahme und (3) ist die rechte Seite dieser Gleichung gleich $\hat{e}_s(\omega, \sigma)$.

Damit ist (41) für alle $\omega \in N$ bewiesen.

Bezüglich der Metrik

$$\|\omega - \bar{\omega}\| = \sum |\omega^i - \bar{\omega}^i| \quad (42)$$

liegt N in der Menge aller Zustände dicht. Um also die Approximation von e_s durch die $\hat{e}_r + rs$ zu zeigen, muß die Stetigkeit der Funktionen

$$\omega \rightarrow e_s(\omega, \sigma) \quad \text{und} \quad \omega \rightarrow \hat{e}_r(\omega, \sigma)$$

bezüglich der Metrik (42) nachgewiesen werden. Dies aber folgt aus den Definitionen dieser Funktionen durch Standardabschätzungen, die von

$$\|\omega\| = \sum \omega^i < \infty$$

Gebrauch machen. /=/

7. Einige allgemeine Bemerkungen

Eine pre-Halbordnung in der Menge der durch Dichtematrizen darstellbaren Zustände wurde zuerst in [13–15] betrachtet. In [1–7, 16, 20, 21] wurde ihre mathematische Theorie weiterentwickelt und die aus dem endlich-dimensionalen Fall heraus vermutbaren Eigenschaften zu großen Teilen für von Neumannsche Algebren bewiesen. In [14, 15, 20–24] finden sich eine Reihe physikalischer Anwendungen und Beispiele. Hierher gehört auch die Arbeit [8], die die Halbordnung mit der zeitlichen Entwicklung (irreversible Prozesse) in Verbindung zu bringen sucht, und die Zusammenfassung dieser Problematik in [17]. Der Name „Ordnungsstruktur der Zustände“ (d. h. der Zustandsgemische) wurde in [12] eingeführt.

Der klassische, besonders der diskrete Fall, wurde explizit in [10] dargestellt und Anwendungen wurden in [9–11] gegeben.

In der Ordnungsstruktur der Zustände ist die Gleichverteilung ausgezeichnet. In [11] wurde der interessante Versuch unternommen, eine beliebige Verteilung („Referenzverteilung“) an die Stelle der Gleichverteilung zu setzen. Hierzu wurden die Felderhofschen Funktionale benutzt [25] und der in Abschnitt 5 dargestellte Zusammenhang zur Begründung herangezogen, der auf Felderhof und van Kampen zurückgeht.

Die in Abschnitt 1 eingeführten e -Zahlen sind Verallgemeinerungen (für den kommutativen Fall) der Ky-Fan-Funktionale (Ky Fan 1951). Sie zeigen deutlicher als die F-Funktionale, in welcher Weise der zeitliche Verlauf von Wahrscheinlichkeitsverteilungen erfolgt, die zu einem σ -konkaven Prozeß gehören. Für diese Frage und den Zusammenhang mit der master equation siehe auch [18, 19].

Die Verallgemeinerung des in dieser Arbeit Gesagten auf allgemeine Maßräume bereitet keine besonderen Schwierigkeiten. Sei M ein Maßraum und Σ die Familie seiner meßbaren Mengen. Man definiert für ein nicht-atomares Maß σ und ein Wahrscheinlich-

keitsmaß ω

$$e_s(\omega, \sigma) = \sup_N \int_N d\omega, \quad (43)$$

wobei N alle meßbaren Mengen durchläuft, die der Bedingung

$$\int_N d\sigma \leq s \quad (44)$$

genügen. Existiert weiter eine meßbare Funktion μ mit

$$d\omega = \mu d\sigma, \quad (45)$$

so schreiben wir für die zu g gehörende Felderhoffunktion

$$G(\omega, \sigma) = \int g(\mu) d\sigma. \quad (46)$$

Es lassen sich dann auch die in Abschnitt 6 getroffenen Feststellungen sinngemäß treffen und beweisen.

Viel schwieriger und noch offen ist das Problem im nicht-kommutativen Fall. Ist nämlich σ , das Referenzmaß bzw. der Referenzzustand, nicht die Gleichverteilung (eine Spur, ein Spurzustand), so treten Fragen der nicht-kommutativen Algebra auf: Wie definiert man korrekt (im physikalischen Sinne) die Felderhofschen Funktionale? Was ist die richtige Verallgemeinerung der e -Zahlen (43)? Der in [18, 19] gegebene Ansatz ist zweifellos nicht der einzig mögliche.

Literatur

- [1] *Alberti, P. M.*: Preprint, Leipzig: KMU-HEP-7305 (1973).
- [2] -: Preprint, Leipzig: KMU-QFT 7501 (1975).
- [3] -: Preprint, Leipzig: KMU-QFT-6 (1976); Math. Nachr. (im Druck).
- [4] -: Preprint, Leipzig: KMU-QFT-7 (1976); Math. Nachr. (im Druck).
- [5] -: Preprint, Leipzig: KMU-QFT-10 (1976).
- [6] -: Wiss. Z. Karl-Marx-Univ. Leipzig, Math.-Naturwiss. R., 26 (1977) 123, 131.
- [7] -; *Uhlmann, A.*: The order structure of states in C^* - and W^* -algebras. Konferenzber. „Operator algebras, ideals, and their application in theoretical physics“ (in Vorb.).
- [8] *Lassner, G.*; *Lassner, Gi.*: Preprint, Dubna: E 2-7537 (1973).
- [9] *Mead, A.*: J. Chem. Phys. 66 (1977) 459.
- [10] *Ruch, E.*: Theor. Chim. Acta (Berlin) 38 (1975) 167.
- [11] -; *Mead, A.*: Theor. Chim. Acta (Berlin) 41 (1976) 95.
- [12] *Thirring, W.*: Vorlesungen über Mathematische Physik. Wien 1975.
- [13] *Uhlmann, A.*: Wiss. Z. Karl-Marx-Univ. Leipzig, Math.-Naturwiss. R., 20 (1971) 633.
- [14] -: Wiss. Z. Karl-Marx-Univ. Leipzig, Math.-Naturwiss. R., 21 (1972) 421.
- [15] -: Wiss. Z. Karl-Marx-Univ. Leipzig, Math.-Naturwiss. R., 22 (1973) 139.
- [16] -: Rep. Math. Phys. 7 (1975) 449.
- [17] -: Sitzungsber. AdW DDR 14 N (1975).
- [18] -: Preprint, Leipzig: KMU-QFT-3 (1977).
- [19] -: Markov Master Equation and the behaviour of some entropy - like quantities. Rostocker Phys. Ms., H. 2 (1977).
- [20] *Wehrl, A.*: Rep. Math. Phys. 6 (1974) 15.
- [21] -: Acta Phys. Austr. 41 (1975) 197.
- [22] -: Remarks on A-entropy. Rep. Math. Phys. (in Vorb.).
- [23] -: Basic properties of entropy in quantum mechanics. Proc. CIME Summer School on Statist. Phys., Bressanone/Brixen (1976).
- [24] -: General properties of entropy. Preprint, Wien (1976).
- [25] -; *van Kampen, N. G.*: Lecture Notes (1970).

Zusammenfassung

Wir betrachten Zustände physikalischer Systeme, die sich durch diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilungen beschreiben lassen. Auf der Menge dieser Zustände führen wir Ordnungsstrukturen ein und analysieren sie. Alle Lösungen einer gegebenen master equation sind gerichtet bezüglich einer gewissen Ordnungsstruktur. Wir untersuchen den Zusammenhang zwischen diesem Verhalten und den sog. H-Theoremen von Felderhof-van Kampen.

Schlüsselwörter: statistische Physik – H-Theoreme – Entropie – master equation

Ключевые слова: Статистическая физика – H-теорема – энтропия – кинетическое уравнение

Key terms: Statistical physics – H-theorems – entropy – master equation

Mots-clés: Physique statistique – théorèmes H – entropie – master equation

Verfasser: Prof. Dr. sc. nat. *A. Uhlmann*,
Karl-Marx-Universität, Sektion Physik,
DDR-701 Leipzig, Karl-Marx-Platz 10