**Zeitschrift:** Helvetica Physica Acta
**Band:** 44 (1971)
**Heft:** 1

**Artikel:** Bemerkungen über quantenmechanische Entropie-Ungleichungen
**Autor:** Baumann, Fritz
**DOI:** https://doi.org/10.5169/seals-114268

# Bemerkungen über quantenmechanische Entropie-Ungleichungen[1]

von **Fritz Baumann**

Seminar für theoretische Physik der Eidgenössischen Technischen Hochschule, Zürich

(24. VII. 70)

*Abstract.* In a first part we check the validity of a conjecture of D. Robinson and D. Ruelle, concerning the quantum entropy. The partial results obtained tend to confirm it.

The second part deals with a generalization of an expression for the skew information defined by E. Wigner and M. Yanase; it is shown, that for Quaternions an important convexity property holds.

## 1. Einleitung

Von zwei Klassen von Entropie-Ungleichungen wird im folgenden die Rede sein.

Die erste Klasse hat sich aus den Bemühungen ergeben, eine wichtige Vermutung von D. Robinson und D. Ruelle [1] über die quantenmechanische Entropie, nämlich deren strenge Subadditivität, zu beweisen.

Anlass zur zweiten Klasse gibt eine Konvexitätseigenschaft der schiefen Information nach der Definition von E. Wigner und M. Yanase.

Bei den Beweisen haben wir uns mit der Wiedergabe der leitenden Ideen begnügt (ausführlich sind sie in [2] zu finden), denn diese Zusammenfassung bezweckt vor allem, auf die noch bestehenden, erheblichen Lücken aufmerksam zu machen.

## 2. Die Robinson-Ruellesche Vermutung

Einem positiven Operator $P$ aus der Spurenklasse mit Spur 1 über einem Hilbertraum $\mathfrak{H}$ wird die Entropie $S(P) \equiv -\mathrm{Sp}\, P \log P$ zugeordnet. Diese kann bekanntlich aufgefasst werden als Mass für die Unkenntnis des durch $P$ eindeutig festgelegten Zustandes aus einer Algebra von Observablen. Das kommt etwa im Trennungssatz zum Ausdruck, welcher besagt, dass die Entropie eines aus zwei Teilsystemen zusammengesetzten quantenmechanischen Systems beim Vernachlässigen der möglicherweise vorhandenen Korrelation zwischen beiden Teilen zunimmt. Die Robinson-Ruellesche Vermutung kann aufgefasst werden als Verallgemeinerung dieses Satzes und bezieht sich auf den Fall, dass $\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2 \otimes \mathfrak{H}_3$ das Tensorprodukt von drei

---

[1]) Auszug aus der ETHZ-Dissertation (Nr. 4503) des Autors.

Hilberträumen ist. Sei $P_{123}$ der gegebene Zustand, $P_{ik}$ die partielle Spur über $\mathfrak{H}_l$ ($\{i, k, l\} = \{1, 2, 3\}$), $P_i$ die Spur über $\mathfrak{H}_k \otimes \mathfrak{H}_l$, dann lautet die Vermutung:

$$S(P_1 \otimes P_{23}) - S(P_{123}) \geqq S(P_1 \otimes P_2) - S(P_{12}) . \tag{1}$$

Weil die Entropie unkorrelierter Systeme additiv ist, kann (1) leicht umgeformt werden zu

$$F(P_{123}) \equiv - S(P_{123}) + S(P_{12}) + S(P_{23}) - S(P_2) \geqq 0 . \tag{RR}$$

Im Gegensatz zur klassischen statistischen Mechanik, in welcher die äquivalenten Ungleichungen (1) und (RR) Gültigkeit besitzen (ein Beweis findet sich in [1]), konnten sie bisher für den quantenmechanischen Fall allgemein nicht bewiesen werden [3]. Es existieren lediglich Teilresultate.

## 3. Ein Spezialfall von (RR)

Unter der Voraussetzung endlich dimensionaler Hilberträume befassen wir uns zunächst mit einer Ungleichung, die ein Spezialfall von (RR) ist. Allerdings fehlt uns der allgemeine Beweis; deshalb formulieren wir die Aussage als

*Vermutung:* Sei $\mathfrak{H}$ ein endlich dimensionaler (komplexer) Hilbertraum, $A_{kl}$ ein positiver Operator über $\mathfrak{H}$, $k \in \{1, \ldots, m\}$, $l \in \{1, \ldots, n\}$. Dann gilt:

$$- \sum_{k,l} S(A_{kl}) + \sum_k S(\sum_l A_{kl}) + \sum_t S(\sum_l A_{kl}) - S(\sum_{k,l} A_{kl}) \geqq 0 . \tag{2}$$

Als Verallgemeinerung eines bekannten Theorems über die Entropie endlicher Wahrscheinlichkeitsvektoren (etwa K. Jacobs [4], part II, § 10.4) kommt (2) eine selbständige Bedeutung zu.

(RR) führt unter folgenden Annahmen auf die Ungleichung (2):

es sei $\dim \mathfrak{H}_i$ endlich, $i = 1, 2, 3$; es existieren Orthonormalbasen $\{u_k\}$ von $\mathfrak{H}_1$ und $\{w_1\}$ von $\mathfrak{H}_3$, so dass $(u_k \otimes v \otimes w_{l'}, P_{123}\, u_{k.} \otimes v' \otimes w_{l.}) = \delta_{kk'} \delta_{ll'} N(v, A_{kl} v')$, für alle $v, v' \in \mathfrak{H}_2$; $0 < A_{kl} \in \mathfrak{L}(\mathfrak{H}_2)$, $N$ ein Normierungsfaktor.

Für den *Beweis* können wir uns auf strikte positive $A_{kl}$ beschränken, denn diese bilden einen offenen, konvexen Kegel, auf dessen Abschliessung die Entropie eine stetige Funktion ist. Nun ist es leicht möglich, mit Induktion auf die Äquivalenz von (2) mit der Konvexität der Funktion

$$\left.\begin{aligned} &\Delta(A, B) \equiv S(A + B) - S(A) - S(B) \\ &0 < A \in \mathfrak{L}(\mathfrak{H}) , \quad 0 < B \in \mathfrak{L}(\mathfrak{H}) , \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

in beiden Argumenten zu schliessen. Ausgeschrieben bedeutet dies: (2) ist äquivalent mit:

$$\left.\begin{aligned} &\Delta\big(1/2\,(A_1 + A_2), 1/2\,(B_1 + B_2)\big) \leqq 1/2\,\Delta(A_1, B_1) + 1/2\,\Delta(A_2, B_2) , \\ &\text{für alle } 0 < A_i \in \mathfrak{L}(\mathfrak{H}),\ 0 < B_i \in \mathfrak{L}(\mathfrak{H}),\ i = 1, 2 . \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

Nach dem üblichen Kriterium formen wir die Bedingung (4) um in eine Aussage über das zu $\Delta(.,.)$ gehörige zweite Differential. Unter Verwendung der Integraldarstellung der Entropie $S(A)$ für $0 < A \in \mathfrak{L}(\mathfrak{H})$ mittels der Resolvente, findet man nach zweimaliger Ableitung, wenn $X = X^* \in \mathfrak{L}(\mathfrak{H})$ das Inkrement von $A$ bezeichnet:

$$d^2 S(A)\,(X) \equiv -q(A; X) = -\int_0^\infty dt\; Sp\,(t + A)^{-1}\, X\, (t + A)^{-1}\, X \quad . \tag{5}$$

Äquivalent zu (4) ist nun offensichtlich:

$$\left.\begin{aligned} &q(A; X) + q(B; Y) - q(A + B; X + Y) \geqq 0\,, \\ &\text{für alle } A > 0,\ B > 0,\ X = X^*,\ Y = Y^*\,. \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

Aus (5) ergibt sich für ein $t > 0$ unmittelbar $q(t\,A; t\,X) = t\,q(A; X)$; daher ist (6) wieder eine Konvexitätsaussage für $q(.\,;.)$ und besitzt genau dann Gültigkeit, wenn das zweite Differential von $q(.\,;.)$ eine positiv-semidefinite Bilinearform in den Inkrementen ist. Dies ist der Fall für $dim\,\mathfrak{H} = 2$, hier stimmt also die Vermutung. Für höhere Dimensionen steht ein Beweis noch aus.

## 4. Diskussion von Extremalstellen

Wie steht es mit (RR) in der Nähe des «klassischen» Falles, in welchem $P_{123}$ in einer Produktbasis diagonal ist?

Uns interessieren hier Umgebungen von Punkten, in welchen in der Vermutung das Gleichheitszeichen gilt. Ausgangspunkt bildet das

*Lemma* 1[2]): Die Robinson-Ruellesche Vermutung (RR) ist richtig, falls $P_{12} \otimes \mathbf{1}_3$ und $\mathbf{1}_1 \otimes P_{23}$ kommutieren.

Der *Beweis* ist elementar, die Behauptung lässt sich auf die Kleinsche Ungleichung [6] zurückführen. Diese liefert uns zusätzlich Nullstellen des in (RR) definierten reellwertigen Funktionals $F$ auf der konvexen Menge der Zustände:

$[P_{12} \otimes \mathbf{1}_3, \mathbf{1}_1 \otimes P_{23}] = 0$ vorausgesetzt, gilt:

$$F(P_{123}) = 0 \;\; \lessgtr \;\; P_{123} \cdot \mathbf{1}_1 \otimes P_2 \otimes \mathbf{1}_3 = P_{12} \otimes \mathbf{1}_3 \cdot \mathbf{1}_1 \otimes P_{23}\,. \tag{7}$$

Damit $F(.)$ ein *positives* Funktional ist, muss es sich bei den in (7) angegebenen Nullstellen um lokale Minima handeln. Ob dies allgemein zutrifft, ist eine noch offene Frage; beweisen konnten wir das

*Lemma 2:* Zustände $P_{123}$ zu einem Hilbertraum $\mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2 \otimes \mathfrak{H}_3$, die in einer Produktbasis auf Diagonalform gebracht werden können und die zusätzlich $P_{123} \cdot \mathbf{1}_1 \otimes P_2 \otimes \mathbf{1}_3 = P_{12} \otimes \mathbf{1}_3 \cdot \mathbf{1}_1 \otimes P_{23}$ erfüllen, sind Nullstellen und zugleich lokale Minima von $F(P_{123}) \equiv -S(P_{123}) + S(P_{12}) + S(P_{23}) - S(P_2)$.

Selbst für diese stark eingeschränkte Klasse von statistischen Operatoren $P_{123}$ führen die Minima-Bedingungen zu sehr unhandlichen Ungleichungen, welche sich aber wieder zu einer Konvexitätsaussage reduzieren lassen. Diese besagt, dass die Funktion

$$\Phi(\lambda, \mu; x, y) \equiv x^2[a\,\lambda, b\,\mu] + y^2[c\,\lambda, d\,\mu] - (x + y)^2\,[(a + c)\,\lambda, (b + d)\,\mu]\,,$$

$x, y \in \mathsf{R}$; $\lambda, \mu, a, b, c, d$ alle positiv,

[2]) H. Araki und E. Lieb [5] haben die Gültigkeit von (RR) unter schwächerer Voraussetzung $[P_2 \times 1_3, P_{23}] = 0$ bewiesen.

$$[\sigma, \tau] \equiv \frac{\log\sigma - \log\tau}{/\sigma - \tau},$$

konvex ist in den vier Variablen $\lambda$, $\mu$; $x$, $y$.

## 5. Die Ungleichungen von Araki und Lieb

Eine teilweise Bestätigung der Robinson-Ruelleschen Vermutung haben H. Araki und E. Lieb in einem kürzlich veröffentlichten Preprint [5] geliefert. Daraus zitieren wir das Haupttheorem:

*Satz:* Sei $P_{123}$ ein statistischer Operator zu $\mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2 \otimes \mathfrak{H}_3$. Dann gilt:

$$-S(P_{123}) + S(P_{12}) + S(P_{23}) \geqq -\log Sp^2(P_2)^2 \geqq 0\,; \tag{8}$$

falls $P_2 \otimes 1_3$ mit $P_{23}$ kommutiert, stimmt die Ronbinson-Ruellesche Vermutung (RR).

(8) ist eine Abschwächung von (RR), wie man sich auf Grund der Beziehung $S(P) \geqq -\log Sp(P)^2$ leicht überzeugt. Weiter folgt aus (8) der

*Trennungssatz:* $-S(P_{12}) + S(P_1) + S(P_2) \geqq 0$.

Ebenso ergibt sich aus (8) eine Abschätzung der Entropie $S(P_{12})$ nach unten:

*Korollar:* $P_{12}$ sein ein Zustand zu $\mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2$, $P_i$ die partielle Spur in $\mathfrak{H}_k$, $i \neq k$, $i, k \in \{1, 2\}$. Dann gilt:

$$|\,S(P_1) - S(P_2)\,| \leqq S(P_{12}) \leqq S(P_1) + S(P_2)\,. \tag{9}$$

In weiteren Spezialfällen erweist sich (RR) als richtig. Mit Hilfe der Ungleichung (9) kann unmittelbar das folgende Lemma bewiesen werden

*Lemma* 3: Falls $P_{123}$ oder einer der reduzierten statistischen Operatoren ein reiner Fall ist ($P^2 = P$), so stimmt die Robinson-Ruellesche Vermutung (RR); ebenso gelten die durch Permutation der Indizes daraus hervorgehenden Ungleichungen.

Abgesehen von der Bedeutung der Robinson-Ruelleschen Vermutung im Rahmen einer Axiomatik für die quantenmechanische Entropie, wurde an ihrem Beweis (bisher vergeblich) gearbeitet, um als Anwendung der Ungleichung (RR) eine Lücke in der Theorie der mittleren Entropie in der Quantenstatistik [3] schliessen zu können. In diesem Zusammenhang sei erwähnt, dass H. Araki und E. Lieb die Existenz der mittleren Entropie beim Übergang zum thermodynamischen Limes von translationsinvarianten Zuständen quanten-kontinuierlicher Systeme mit der schwächeren Ungleichung (8) beweisen konnten [5].

## 6. Verallgemeinerung einer Matrixungleichung von E. Wigner und M. Yanase

Es sei $P$ ein Zustand zum Hilbertraum $\mathfrak{H}$, $P^\varkappa$ ($\varkappa > 0$) die $\varkappa$-te Potenz von $P$ und $K$ ein selbstadjungierter Operator aus $\mathfrak{L}(\mathfrak{H})$, dann lautet die von F. Dyson vorgeschlagene Verallgemeinerung der von E. Wigner und M. Yanase definierten schiefen Information von $P$ relativ zu $K$:

$$\left.\begin{aligned} &I_\varkappa(K, P) \equiv 1/2\, Sp[K, P^\varkappa]\,[P^{1-\varkappa}, K]\,, \\ &0 < \varkappa \leqq 1/2\,. \end{aligned}\right\} \tag{10}$$

$\varkappa = 1/2$ entspricht dem Wigner-Yanaseschen Fall. $I_{1/2}(K,.)$ ist konvex im zweiten Argument [7, 8], und es ist zu vermuten, dass auch $I_\varkappa(K,.)$ für $0 \leqq \varkappa \leqq 1/2$ diese Eigenschaft besitzt. (Unter $I_0(K, P)$ verstehen wir den Ausdruck $1/2\; Sp\;[K, P]\,[\log P, K]$.)

Auch diese Vermutung ist bisher unbewiesen geblieben; uns gelingt nur der Beweis im ersten nichttrivialen Fall, nämlich für $\dim \mathfrak{H} = 2$.

Hier können wir für $P$ und $K$ die Spinordarstellung

$$P = x_0 \cdot \mathbf{1} + (x, \sigma)\,; \; x_0 \in \mathsf{R},\; x \in \mathsf{R}^3\,,$$

$$K = k_0 \cdot \mathbf{1} + (k, \sigma)\,; \; k_0 \in \mathsf{R},\; k \in \mathsf{R}^3 \tag{11}$$

verwenden. Dabei bilden die Komponenten von $\sigma$ die Pauli-Spinmatrizen.

Da $P$ die beiden Eigenwerte

$$\lambda_1 = x_0 + \|x\| \equiv e^{2\chi_1} \text{ und } \lambda_2 = x_0 - \|x\| \equiv e^{2\chi_2} \tag{12}$$

besitzt, ist $x_0 > \|x\|$ äquivalent zu $P$ strikte positiv. Aus Stetigkeitsgründen kann man sich beim Beweis der Konvexität von $I_\varkappa(K,.)$ auf solche Zustände beschränken.

Die Spur von (10) in der Eigenbasis von $P$ ausgerechnet, führt mit der Definition $\chi \equiv \chi_1 - \chi_2$ zu folgendem, unitär invarianten, Ausdruck:

$$I_\varkappa(K, P) = 2\,\frac{\|x \wedge k\|^2}{\|x\|^2} \cdot x_0 \cdot \left((1 - \frac{\mathrm{Ch}\,\alpha\,\chi}{\mathrm{Ch}\,\chi}\right), \tag{13}$$

wobei $\alpha \equiv 1 - 2\,\varkappa$, $0 < \varkappa \leqq 1/2$ und

$$\chi = 1/2 \log \frac{x_0 + \|x\|}{x_0 - \|x\|}$$

ist.

Analog findet man für den Grenzfall $\varkappa = 0$:

$$I_0(K, P) = 4\,\frac{\|x \wedge k\|^2}{\|x\|^2} \cdot x_0 \cdot \chi \cdot \mathrm{Tgh}\,\chi\;\cdot \tag{14}$$

Die Spinkomponenten $x_0$, $x_1$, $x_2$, $x_3$ sind lineare Parameter für $P$. Um die vermutete Konvexität zu beweisen, untersuchen wir deshalb, ob die zweite Variation von (13), respektive von (14), nach diesen vier Parametern positiv-semidefinit ist; dabei bedeuten die Annahmen $x_0 = 1$ (Festhaltung der Spur) und $k = e_3$ keine Einschränkung der Allgemeinheit. Somit müssen wir

$$I_\varkappa(x) = 2\,(x_2^2 + x_1^2)\,\|x\|^{-2} \left(1 - \frac{\mathrm{Ch}\,\alpha\,\chi}{\mathrm{Ch}\,\chi}\right),$$

$$\chi = 1/2 \log \frac{1 + \|x\|}{1 - \|x\|}\; 0 < \varkappa \leqq 1/2\,, \tag{15}$$

respektive

$$I_0(x) = 4\,(x_2^1 + x_2^2)\,\|x\|^{-1} \cdot \chi\,, \tag{16}$$

auf die Konvexität in $x_1$, $x_2$, $x_3$ prüfen.

Auf Grund eines speziell auf die Struktur von $I_\varkappa(x)$ zugeschnittenen Kriteriums gelingt mit Methoden der komplexen Integration dieser Nachweis.

Für Quaternionen ist also die verallgemeinerte schiefe Information $I_\varkappa(K,.)$, $0 \leqq \varkappa \leqq 1/2$, im zweiten Argument tatsächlich konvex.

Die angedeutete Beweismethode ist jedoch zu speziell, um auf höhere Dimensionen übertragen werden zu können.

Herrn Prof. Dr. R. Jost sei hier mein verbindlichster Dank ausgesprochen. Seine Unterstützung und wegweisenden Ratschläge haben die meisten der oben skizzenhaft angeführten Beweise erst ermöglicht.

## REFERENZEN

[1] D. Robinson und D. Ruelle, Commun. Math. Phys. *5*, 288 (1967).

[2] F. Baumann, *Über quantenmechanische Entropie-Ungleichungen*, Dissertation (Juris Druck + Verlag, Zürich 1970).

[3] O. Lanford und D. Robinson, J. Math. Phys. *9*, 1120 (1968).

[4] K. Jacobs, *Lecture Notes on Ergodic Theory* (Aarhus 1962/63).

[5] H. Araki und E. Lieb, *Entropy Inequalities*, preprint, wird in Commun. Math. Phys. erscheinen.

[6] D. Ruelle, *Statistical Mechanics* (W. A. Benjamin, New York 1969), Propos. 2.5.2.

[7] E. Wigner und M. Yanase, (a) Proc. Nat. Acad. Sci. *49*, 910 (1963); (b) Canad. J. Math. *16*, 397 (1964).

[8] R. Jost, *Über eine Ungleichung von E. Wigner und M. Yanase*, Festschrift für G. Wentzel (University of Chicago).