B1 (erweitert) – Gibbs-Reduktionslemma, Trotter-Stabilität und Laplace-konsistentes Coarse-Graining auf dem ST-Graph

mit Code ↔ Formel-Mapping für das PoC

Kurzfassung. Wir arbeiten endlichdimensional (Graph-Laplaciane). Für $H = H_S \otimes \mathbf{1}_E + \mathbf{1}_S \otimes H_E$ gilt *exakt* $\mathrm{e}^{-\beta H} = \mathrm{e}^{-\beta H_S} \otimes \mathrm{e}^{-\beta H_E}$; daraus folgt die Reduktionsformel $\mathrm{Tr}_E \frac{\mathrm{e}^{-\beta H}}{\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta H}} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta H_S}}{\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta H_S}}$. Auf dem Sierpiński-Tetraeder (ST) definieren wir $L_{\mathrm{lift}} = C^\top L_0 C$ (Aggregation C mit Zeilensummen 1, Rekonstruktion $C^\top$) und die Approximanten $L_A(\alpha) = (1-\alpha)L + \alpha L_{\mathrm{lift}}$. Wir zeigen: L_{lift} ist symmetrisch, positiv semidefinit (PSD) und $L_{\mathrm{lift}}\mathbf{1} = 0$. Damit ist $L_A(\alpha)$ für $\alpha \in [0,1]$ wieder PSD und hat $\mathbf{1}$ im Kern. Gibbs-Zustände $\rho \propto \mathrm{e}^{-\beta L}$ bzw. $\mathrm{e}^{-\beta L_A(\alpha)}$ sind wohldefiniert; $E = \mathrm{Tr}(\rho L)$, $S = -\,\mathrm{Tr}(\rho \log \rho)$, $P = \mathrm{Tr}(\rho^2)$ folgen in Spektraldarstellung.

1 Vollständiger Beweis

1.1 Faktorisierung und Teilspur

Lemma 1.1 (Kronecker-Summe, exakte Faktorisierung)**.** *Für endlichdimensionale selbstadjungierte H_S, H_E gilt*

$$\mathrm{e}^{-\beta(H_S \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes H_E)} = \mathrm{e}^{-\beta H_S} \otimes \mathrm{e}^{-\beta H_E} \qquad (\beta \in \mathbb{R}). \tag{1.1}$$

Beweis. $X := H_S \otimes \mathbf{1}$ und $Y := \mathbf{1} \otimes H_E$ kommutieren, also $\mathrm{e}^{-(X+Y)\beta} = \mathrm{e}^{-\beta X}\mathrm{e}^{-\beta Y}$ (funktionaler Kalkül/Baker–Campbell–Hausdorff für $[X,Y] = 0$). □

Lemma 1.2 (Gibbs-Reduktionslemma)**.** *Definiere $\rho_{SE}(\beta) := \mathrm{e}^{-\beta H} / \mathrm{Tr}_{SE}\, \mathrm{e}^{-\beta H}$ mit H aus Lemma 1.1. Dann*

$$\mathrm{Tr}_E\, \rho_{SE}(\beta) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta H_S}}{\mathrm{Tr}_S\, \mathrm{e}^{-\beta H_S}} =: \rho_S(\beta). \tag{1.2}$$

Beweis. Aus (1.1) folgt $\mathrm{e}^{-\beta H} = \mathrm{e}^{-\beta H_S} \otimes \mathrm{e}^{-\beta H_E}$ und $\mathrm{Tr}_{SE}\, \mathrm{e}^{-\beta H} = (\mathrm{Tr}_S\, \mathrm{e}^{-\beta H_S})(\mathrm{Tr}_E\, \mathrm{e}^{-\beta H_E})$. Weiter gilt $\mathrm{Tr}_E(A \otimes B) = (\mathrm{Tr}\, B)\, A$. □

Bemerkung 1.3 (Stabilität)*.* Für *nicht* kommutierende Summanden liefert die Lie–Trotter-Formel $\mathrm{e}^{-\beta(A+B)} = \lim_{n\to\infty}(\mathrm{e}^{-\beta A/n}\mathrm{e}^{-\beta B/n})^n$ und die Golden–Thompson-Ungleichung $\mathrm{Tr}\, \mathrm{e}^{A+B} \le \mathrm{Tr}\,(\mathrm{e}^A \mathrm{e}^B)$. Wir benötigen beides nicht, es erhöht aber die Robustheit der Reduktion, falls schwache Kopplungsterme modelliert werden.

1.2 Laplacian, Lift und Approximanten

Definition 1.4 (ST-Urgraph und Laplacian)**.** Sei $G = (V, E)$ ein (verbundener) ST-Level-Graph; $L = D - A$ der symmetrische Graph-Laplacian.

Lemma 1.5 (Kern und PSD)**.** *L ist PSD und $L\mathbf{1} = 0$. Für einen verbundenen Graphen ist* $\dim\ker L = 1$.

Beweis. Standard: $x^\top L x = \frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in E}(x_i - x_j)^2 \ge 0$ und $\sum_j L_{ij} = 0$. □

Proposition 1.6 (Galerkin-Lift)**.** *Sei $C \in \mathbb{R}^{c\times n}$ eine Aggregationsmatrix mit Zeilensummen* 1 *und $R := C^\top$. Für einen groben Laplacian L_0 sei $L_{\mathrm{lift}} := R\, L_0\, C$. Dann gilt:*

i) L_{lift} ist symmetrisch und PSD: $x^\top L_{\mathrm{lift}} x = (Cx)^\top L_0 (Cx) \ge 0$.

ii) $L_{\mathrm{lift}}\mathbf{1} = 0$ (da $C\mathbf{1} = \mathbf{1}_c$ und $L_0\mathbf{1}_c = 0$).

Korollar 1.7 (Approximantenfamilie)**.** *Für $\alpha \in [0,1]$ sei $L_A(\alpha) = (1-\alpha)L + \alpha L_{\mathrm{lift}}$. Dann $L_A(\alpha)$ ist symmetrisch, PSD und $L_A(\alpha)\mathbf{1} = 0$.*

1.3 B1: Gibbs-Zustände und Observablen

Satz 1.8 (B1)**.** *Für $\beta > 0$ definieren*

$$\rho_U(\beta) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta L}}{\mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta L}}, \qquad \rho_A(\alpha;\beta) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta L_A(\alpha)}}{\mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta L_A(\alpha)}}. \tag{1.3}$$

Dann gilt für jedes Umgebungs-Hamiltonian H_E (endlichdimensional)

$$\rho_U(\beta) = \mathrm{Tr}_E \frac{\mathrm{e}^{-\beta(L\otimes\mathbf{1}+\mathbf{1}\otimes H_E)}}{\mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta(L\otimes\mathbf{1}+\mathbf{1}\otimes H_E)}}, \tag{1.4}$$

$$\rho_A(\alpha;\beta) = \mathrm{Tr}_E \frac{\mathrm{e}^{-\beta(L_A(\alpha)\otimes\mathbf{1}+\mathbf{1}\otimes H_E)}}{\mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta(L_A(\alpha)\otimes\mathbf{1}+\mathbf{1}\otimes H_E)}}. \tag{1.5}$$

In Spektraldarstellung $L = Q\Lambda Q^\top$ ist $\rho_U = Q\,\mathrm{diag}(p)\,Q^\top$ mit $p_i = \mathrm{e}^{-\beta\lambda_i}/\sum_j \mathrm{e}^{-\beta\lambda_j}$ und analog für $L_A(\alpha)$. Die Observablen sind

$$E = \mathrm{Tr}(\rho L) = \sum_i p_i\lambda_i, \qquad S = -\mathrm{Tr}(\rho\log\rho) = -\sum_i p_i\log p_i, \qquad P = \mathrm{Tr}(\rho^2) = \sum_i p_i^2. \tag{1.6}$$

Beweis. Lemmas 1.1, 1.2 und Korollar 1.7. □

Thermodynamische Identitäten. Mit $Z(\beta) = \mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta L}$ gilt $\partial_\beta \log Z = -E$ und $\partial_\beta^2 \log Z = \mathrm{Var}_\rho(L) \geq 0$.

2 Code ↔ Formel (PoC)

- `build_graph_by_addresses(level)`: konstruiert Level-m-Graph (V_m, E_m), liefert Punkte V_m, Adjazenz A_m, Laplacian L_m.
- `L_A_alpha(alpha)`: $L_A(\alpha) = (1-\alpha)L_4 + \alpha L_{\mathrm{lift}}$ (Urgraph-Level 4).
- `C` (`c×n`), `R=C.T`, `L0`: Aggregation/Rekonstruktion auf $c = 4$ Superknoten; Lift $L_{\mathrm{lift}} = R\,L_0\,C$.
- `reduced_density_via_partial_trace(L, beta, env_evals)`: implementiert Lemma 1.2 durch $w_{\mathrm{env}} = \mathrm{e}^{-\beta\mu_k}$, $Z_{\mathrm{env}} = \sum_k w_{\mathrm{env}}$, $p_i \propto \mathrm{e}^{-\beta\lambda_i} Z_{\mathrm{env}}$; $\rho = Q\,\mathrm{diag}(p)\,Q^\top$.
- `energy_from_spectrum`, `entropy_from_p`, `purity_from_p`: berechnen E, S, P wie oben.
- `L_A_sub_alpha`: Subgraph-Variante für Animation; beobachtete Kurven in den GIFs entsprechen $E(\alpha), S(\alpha), P(\alpha)$.

3 Randfälle und Angriffspunkte

- **Nullraum/Degeneranz.** Für verbundene Graphen ist $\ker L = \mathrm{span}\{\mathbf{1}\}$; ansonsten mischt ρ die Komponenten (kein Problem).
- **Numerische Symmetrisierung.** Im Code wird $L_{\mathrm{lift}} \leftarrow (L_{\mathrm{lift}} + L_{\mathrm{lift}}^\top)/2$ gesetzt; analytisch ist Symmetrie bereits durch $R = C^\top$ garantiert.
- **Nichtkommutative Kopplung.** Falls ein (schwacher) Kopplungsterm V hinzugefügt würde, sichern Lie–Trotter/Golden–Thompson Approximations- und Spurabschätzungen ab.
- **Parameter β.** Alle Aussagen gelten für $\beta > 0$. Thermodynamische Identitäten folgen aus $Z(\beta) = \mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta L}$.

Quellen (Primärliteratur/Monographien)

- Horn & Johnson, *Matrix Analysis*, 2nd ed., CUP (Faktorisierung bei kommutierenden Summanden; Block/Kronecker-Kalkül).
- Nielsen & Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, CUP (Teilspur, reduzierte Zustände).
- Fan Chung, *Spectral Graph Theory*, CBMS (Laplacian: PSD, Kern enthält Konstanten; Verbindung zur Random-Walk-Stationärverteilung).
- Neidhardt et al., Exner et al., *Trotter–Kato-Formeln* (Stabilität/Normkonvergenz).
- Notay; Huang et al., *Aggregation/Galerkin in AMG* (SPD-Erhaltung $P^\top AP$; Erhaltung der Near-Nullspace-Moden wie Konstanten).
- Forrester & Thompson, *Golden–Thompson inequality* (Spurabschätzung).

Appendix A: Numerische Konsistenzchecks (ST-Graph, Level 4)

Tabelle 1: ST-Graph (Level 4): Konsistenz- und Observablen-Checks bei $\beta = 3$.

α	$\lambda_{\min}(L_A)$	$\|L_A\mathbf{1}\|_2$	E	S	P
0.00	-1.785e-15	0.000e+00	0.268043	3.447838	0.042732
0.25	2.706e-16	2.003e-13	0.277231	3.707486	0.032441
0.50	-8.407e-16	5.756e-14	0.266696	4.002944	0.022838
0.75	-1.769e-16	4.134e-14	0.311603	4.707514	0.012876
1.00	-1.800e-17	2.752e-16	0.000166	6.242199	0.001946

Reduktionsfehler: $\|\mathrm{Tr}_E(\rho_{\mathrm{tot}}) - \rho(L)\|_F = 1.99e-16$. Thermo: $|E + \partial_\beta \log Z| = 9.92e-11$, $\partial_\beta^2 \log Z = 1.075241e-01$, $\mathrm{Var}(L) = 1.075241e-01$.

Appendix B: Urgraph (voll) vs. Approximant-Subgraph

Tabelle 2: Urgraph (voll) vs. Approximant-Subgraph (Level 4, Subgraph $N_{\mathrm{sub}} = 160$) bei $\beta = 3$.

Modell	E	S	P
Urgraph (n=514)	0.268043	3.447838	0.042732
Approximant-Subgraph $L_A^{\mathrm{sub}}(\alpha) = (1-\alpha)L^{\mathrm{sub}} + \alpha L_{\mathrm{lift}}^{\mathrm{sub}}$			
$\alpha = 0.00$	1.435179	0.555224	0.811794
$\alpha = 0.25$	1.288974	1.280182	0.549102
$\alpha = 0.50$	1.224950	2.609951	0.196850
$\alpha = 0.75$	1.003994	4.309108	0.025661
$\alpha = 1.00$	0.000177	5.075166	0.006250

Hinweis: Werte sind *nicht skaleninvariant* in n; der Subgraph hat geringere Dimension.