B1 – Formale Ergebnisse und Beweise (ST-Graph, Teilspur, Thermodynamik)

antaris

19. August 2025

Zusammenfassung

Wir betrachten den Level-4 Sierpiński–Tetraeder-Graphen $G = (V, E)$ mit kombinatorischem Laplace-Operator $L = D - A$. Aus einem groben Vier-Knoten-Modell wird mittels Aggregation C und Rekonstruktion $R = C^\top$ ein gehobener Operator $L_{\text{lift}} = RL_0C$ erzeugt. Für $\alpha \in [0, 1]$ definieren wir den Approximant

$$L_A(\alpha) = (1 - \alpha)\, L + \alpha\, L_{\text{lift}}.$$

Wir zeigen: (i) $L_A(\alpha)$ ist symmetrisch, positiv semidefinit und besitzt den Konstantenvektor in seinem Kern; (ii) für jedes endliche Environment mit Hamiltonoperator H_E gilt für alle $\beta > 0$

$$\mathrm{Tr}_E\Big(\mathrm{e}^{-\beta\,(L\otimes\mathbf{1}+\mathbf{1}\otimes H_E)}\Big) \propto \mathrm{e}^{-\beta L},$$

sodass die normalisierte reduzierte Dichte genau der Gibbs-Zustand von L ist; (iii) die üblichen thermodynamischen Identitäten

$$E(\beta) = -\partial_\beta \log Z(\beta), \qquad \partial_\beta^2 \log Z(\beta) = \mathrm{Var}_\rho(L) \geq 0$$

gelten. Die Aussagen werden analytisch bewiesen und numerisch verifiziert (vgl. §6).

1 Setup und Notation

Sei G zusammenhängend. Der unnormierte Graph-Laplace-Operator $L = D - A$ ist symmetrisch und positiv semidefinit; sein Kern ist bei Zusammenhängigkeit eindimensional und wird vom Konstantenvektor $\mathbf{1}$ erzeugt [1, 2]. Das grobe Vier-Knoten-Modell besitzt Laplace-Operator L_0 des vollständigen Graphen K_4. Die Aggregation $C \in \mathbb{R}^{4\times|V|}$ mittelt innerhalb der vier Cluster, $R = C^\top$. Wir setzen $L_{\text{lift}} = RL_0C$ und $L_A(\alpha) = (1 - \alpha)L + \alpha L_{\text{lift}}$.

Für $\beta > 0$ definieren wir die Gibbs-Dichte

$$\rho(L, \beta) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta L}}{Z(\beta)}, \qquad Z(\beta) = \mathrm{Tr}\big(\mathrm{e}^{-\beta L}\big).$$

Analoges gilt für $L_A(\alpha)$.

2 Struktursätze für $L, L_{\text{lift}}, L_A(\alpha)$

Lemma 1 (PSD & Kern)**.** *L und L_{lift} sind symmetrisch und positiv semidefinit; es gilt $L\,\mathbf{1} = 0$ sowie $L_{\text{lift}}\,\mathbf{1} = 0$. Insbesondere ist $L_A(\alpha)$ für alle $\alpha \in [0, 1]$ symmetrisch, positiv semidefinit mit $L_A(\alpha)\,\mathbf{1} = 0$.*

Beweis. Die PSD-Eigenschaft von L ist Standard; für alle $x \in \mathbb{R}^{|V|}$ gilt

$$x^\top L x = \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{ij} (x_i - x_j)^2 \geq 0$$

und $L\mathbf{1} = 0$ [1, 2]. Für den Lift: Da C Zeilen besitzt, deren Einträge innerhalb eines Clusters zu 1 aufsummieren, gilt $C\mathbf{1} = \mathbf{1}_4$. Somit

$$L_{\text{lift}} \mathbf{1} = R L_0 C \mathbf{1} = R L_0 \mathbf{1}_4 = R \cdot 0 = 0.$$

Ferner ist L_{lift} symmetrisch, da L_0 symmetrisch ist und $R = C^\top$. Für $x \in \mathbb{R}^{|V|}$ gilt

$$x^\top L_{\text{lift}} x = (Cx)^\top L_0 (Cx) \geq 0,$$

also PSD. Konvexe Kombinationen PSDer symmetrischer Matrizen sind wieder PSD und erhalten die Kerneigenschaft $\mathbf{1} \in \ker L_A(\alpha)$. □

Proposition 2 (Eigenstruktur des Kronecker-Summenoperators)**.** *Seien A und B symmetrisch mit Spektraldarstellungen $A = Q_A \Lambda_A Q_A^\top$, $B = Q_B \Lambda_B Q_B^\top$. Dann hat die Kronecker-Summe $A \oplus B := A \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes B$ die Eigenzerlegung*

$$A \oplus B = (Q_A \otimes Q_B)\,(\Lambda_A \oplus \Lambda_B)\,(Q_A \otimes Q_B)^\top,$$

wobei die Eigenwerte alle Summen $\lambda_i(A) + \lambda_j(B)$ sind. Insbesondere gilt

$$\mathrm{e}^{-\beta(A \oplus B)} = \mathrm{e}^{-\beta A} \otimes \mathrm{e}^{-\beta B} \qquad (\beta \in \mathbb{R}).$$

Beweis. Die bekannten Produktregeln für Kroneckerprodukte liefern $(A \otimes \mathbf{1})(Q_A \otimes Q_B) = (Q_A \Lambda_A) \otimes Q_B$ und analog für $\mathbf{1} \otimes B$. Die Behauptung folgt durch direkte Rechnung, vgl. etwa [3]. Die Exponentialformel ergibt sich durch Spektralkalkül. □

3 Teilspur-Reduktion des Gibbs-Zustands

Satz 3 (Reduktion auf L)**.** *Sei $H_{\text{tot}} = L \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes H_E$ mit einem (endlichdimensionalen) Environment-Hamiltonoperator H_E. Dann gilt für alle $\beta > 0$*

$$\mathrm{Tr}_E\left(\mathrm{e}^{-\beta H_{\text{tot}}}\right) = \mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H_E}\right) \mathrm{e}^{-\beta L}.$$

Nach Normierung ist die reduzierte Dichte $\rho_S = \mathrm{Tr}_E(\rho_{\text{tot}})$ gleich $\rho(L, \beta)$.

Beweis. Nach Proposition 2 und Linearität der partiellen Spur [4, §2.4] gilt

$$\mathrm{Tr}_E\left(\mathrm{e}^{-\beta H_{\text{tot}}}\right) = \mathrm{Tr}_E\left(\mathrm{e}^{-\beta L} \otimes \mathrm{e}^{-\beta H_E}\right) = \mathrm{e}^{-\beta L}\ \mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H_E}\right),$$

da $\mathrm{Tr}_E(X \otimes Y) = X\ \mathrm{Tr}(Y)$. Nach Division durch $Z_{\text{tot}} = \mathrm{Tr}(\mathrm{e}^{-\beta L})\,\mathrm{Tr}(\mathrm{e}^{-\beta H_E})$ folgt die Aussage. Vgl. den operatoralgebraischen Zugang in [5, Kap. 2, 3]. □

4 Thermodynamische Identitäten

Proposition 4. *Für $Z(\beta) = \mathrm{Tr}(\mathrm{e}^{-\beta L})$ und $\rho = \rho(L, \beta)$ gilt*

$$E(\beta) = \mathrm{Tr}(\rho L) = -\partial_\beta \log Z(\beta), \qquad \partial_\beta^2 \log Z(\beta) = \mathrm{Tr}(\rho L^2) - \mathrm{Tr}(\rho L)^2 = \mathrm{Var}_\rho(L) \geq 0.$$

Beweis. Per Spektraldarstellung $L = Q \Lambda Q^\top$ erhält man $Z = \sum_i \mathrm{e}^{-\beta \lambda_i}$ und

$$-\partial_\beta \log Z = \frac{\sum_i \lambda_i\, \mathrm{e}^{-\beta \lambda_i}}{\sum_i \mathrm{e}^{-\beta \lambda_i}} = \sum_i p_i\, \lambda_i = \mathrm{Tr}(\rho L) = E(\beta).$$

Die zweite Ableitung ist $\partial_\beta^2 \log Z = \sum_i p_i \lambda_i^2 - (\sum_i p_i \lambda_i)^2 \geq 0$ (Varianz). Siehe z. B. [5, Kap. 1]. □

5 Stetigkeit in α

Proposition 5. *Die Abbildung $\alpha \mapsto L_A(\alpha)$ ist (polynomial) stetig; die Eigenwerte sind Lipschitz-stetig in α (Weyl). Somit hängen $Z(\beta)$, $E(\beta)$, $S(\beta) = -\operatorname{Tr}(\rho \log \rho)$ und $\operatorname{Tr}(\rho^2)$ stetig von α ab.*

Beweis. Es gilt $L_A(\alpha) = (1-\alpha)L + \alpha L_{\text{lift}}$. Für symmetrische Matrizen liefert Weyls Ungleichung $\max_i |\lambda_i(L_A(\alpha)) - \lambda_i(L_A(\alpha'))| \leq \|L_A(\alpha) - L_A(\alpha')\|_2 \leq |\alpha - \alpha'| \|L - L_{\text{lift}}\|_2$. Stetigkeit der Observablen folgt aus Stetigkeit der Spektralfunktionen. □

6 Numerische Verifikation

Wir reproduzieren drei Kernprüfungen (vgl. beigefügte Artefakte): (i) PSD+Kern für $L_A(\alpha)$, (ii) Teilspur-Identität, (iii) Thermo-Ableitungen.

Hier ist eine saubere LaTeX-Fassung als Tabellen (ohne ‘booktabs‘, damit es überall kompiliert). Du kannst die Blöcke direkt einfügen.

Tabelle 1: Prüf-Setup

Parameter	Wert
n	100
β	3.0
Env-Eigenwerte	$\{0, 1\}$

Tabelle 2: Check 1: Symmetrie, kleinstes Eigenvalue und Kernbedingung über α

α	Symmetrie-Fehler	$\lambda_{\min}$	$\|L_A \mathbf{1}\|_2$
0.00	0	3.688×10^{-16}	0
0.25	0	-4.018×10^{-16}	1.882×10^{-14}
0.50	0	3.199×10^{-16}	1.333×10^{-14}
0.75	0	1.687×10^{-16}	5.167×10^{-15}
1.00	0	-5.008×10^{-17}	5.408×10^{-16}

Tabelle 3: Checks 2 & 3: Teilspur-Identität und thermodynamische Ableitungen

Größe	Wert
$\left\|\operatorname{Tr}_E \rho_{\text{tot}} - \rho(L)\right\|_F$	4.227×10^{-16}
$\left\|E + \partial_\beta \log Z\right\|$	1.197×10^{-10}
$\operatorname{Var}_\rho(L)$ (direkt)	9.693689×10^{-2}
$\partial_\beta^2 \log Z$	9.693688×10^{-2}

Observablen über α (Subgraph)

7 Reproduzierbarkeit & Artefakte

Der zugehörige Python-Code und die erzeugten Animationen (GIFs) sind beigelegt. Einzelne Frames wurden zusätzlich extrahiert (ZIP).

- Code: `B1_v2_check.py`, `B1_v1_partial trace_partial trace on ST-Graph.py`
- Daten: `B1_v2_check_alpha_observables.csv`, Report `B1_v2_check_checks_report.txt`
- GIF-Frames: `B1_B1_frames.zip`

Tabelle 4: Thermische Observablen über den Approximanten $L_A(\alpha)$. Parameter: $n = 100$, $\beta = 3.0$, Environment-Spektrum $\{0, 1\}$.

α	$E = \mathrm{Tr}(\rho L)$	$S = -\mathrm{Tr}(\rho \log \rho)$	$P = \mathrm{Tr}(\rho^2)$
0.000000	0.244396	1.939091	0.186146
0.250000	0.275970	2.209655	0.145043
0.500000	0.313159	2.623000	0.097992
0.750000	0.371128	3.443204	0.045853
1.000000	0.003005	4.602681	0.010043

Beschreibung. Die Tabelle zeigt Energie E, von-Neumann-Entropie S und Purity P des Gibbs-Zustands ρ für den Operator $L_A(\alpha) = (1-\alpha)L + \alpha L_{\mathrm{lift}}$. Mit wachsendem α steigt S und P sinkt (stärkere Mischung), während E zunächst moderat zunimmt und bei $\alpha = 1$ aufgrund des gehobenen Operators stark abfällt.

Diskussion

Die Sätze 1–4 etablieren die wohlgestellte thermische Reduktion auf dem ST-Graphen ohne klassischen Input. Der numerische Report bestätigt (binär) die Kerneigenschaft $L_A(\alpha)\mathbf{1} = 0$, die Positivität, die Teilspurgleichheit und die Thermo-Identitäten bis zur numerischen Toleranz 10^{-10} bis 10^{-16}.

Literatur

[1] F. R. K. Chung, *Lectures on Spectral Graph Theory.* CBMS 92, AMS (1997). Online: UCSD.

[2] U. von Luxburg, *A Tutorial on Spectral Clustering* (2007). Online: PDF.

[3] C. F. Van Loan, *The ubiquitous Kronecker product.* J. Comput. Appl. Math. **123** (2000), 85–100. Online: PDF.

[4] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, 10th Anniversary Ed., Cambridge UP (2010). Online (preprint scan): PDF.

[5] O. Bratteli, D. W. Robinson, *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics II.* Springer (1997, 2002). Online (Springer): PDF.