Zur Anwendung des Informationsbegriffes in der statistischen Physik[1]

Von A. STAHL *

Aus dem Institut für Theoretische Physik der Universität zu Köln

(Z. Naturforschg. **15 a**, 655—662 [1960]; eingegangen am 9. Juni 1960)

Die Arbeit enthält eine Begründung der statistischen Mechanik aus der Informationstheorie. Der Begriff Unordnung wird dabei eliminiert und durch den Begriff der Unkenntnis eines Beobachters ersetzt. Die explizite Berücksichtigung des Beobachters in allen Überlegungen erlaubt einen einfachen Zugang zum Verständnis des Phänomens der Irreversibilität.

Bei der Deutung des Wahrscheinlichkeitsbegriffes kann man zwei verschiedene Anschauungen unterscheiden, die wir kurz die objektive und die subjektive Deutung nennen wollen. Die objektive Deutung führt die Wahrscheinlichkeiten zurück auf relative Häufigkeiten in einer Gesamtheit; nach der subjektiven Deutung ist die Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses ein Maß dafür, wie stark ein Beobachter auf Grund seiner Kenntnisse an das Eintreten dieses Ereignisses glauben darf. Es ist durchaus möglich, daß vom Standpunkt der Erkenntnistheorie gesehen nur eine der beiden Deutungen zulässig ist. Diese Frage wird man aber bei physikalischen Untersuchungen so lange ausklammern können, wie beide Deutungen mit Erfolg in der Physik angewendet werden. Das ist in der Tat der augenblickliche Stand; denn die statistische Mechanik basiert auf dem objektiven Wahrscheinlichkeitsbegriff, während die Wahrscheinlichkeiten in der Quantentheorie zumindest von der großen Mehrzahl der Physiker im subjektiven Sinne gedeutet werden. Dieser Unterschied bedingt, daß in der statistischen Mechanik von einem Beobachter niemals die Rede zu sein braucht, während er in der Quantentheorie explizit vorkommt. Gerade das Beispiel der Quantentheorie lehrt einen wesentlichen Vorzug der subjektiven Deutung. Durch die Hereinnahme des Beobachters in die Beschreibung hat man so etwas wie eine zusätzliche Variable gewonnen. Man sieht das besonders deutlich daran, daß die Elimination des Beobachters anscheinend nur mit der Einführung neuer, schwer erklärbarer Parameter, der vielzitierten verborgenen Parameter erkauft werden kann. Derartige Erfahrungen legen die Vermutung nahe, die subjektive Deutung könnte ganz allgemein die reichhaltigere sein, so daß es sich lohnte, einmal zu untersuchen, wie die statistische Mechanik unter expliziter Berufung auf einen jeweiligen Beobachter zu formulieren wäre. Das ist der Inhalt dieser Arbeit. Das Ergebnis ist eine konsequente Ersetzung des schwer definierbaren Begriffes „Unordnung" durch „Unkenntnis" und daraus resultierend eine Deutungsmöglichkeit für den Übergang von der reversiblen Mikrobeschreibung zur irreversiblen Makrobeschreibung. Den methodischen Ansatzpunkt liefert die Informationstheorie, deren Verhältnis zur statistischen Mechanik in der letzten Zeit mehrfach diskutiert wurde [2–4].

I. Das Informationsmaß

Wir beginnen mit der Definition einiger Begriffe, die in den folgenden Betrachtungen eine wichtige Rolle spielen.

1. Eine Observable ist definiert durch eine Meßvorschrift. Jeder Meßvorgang nach der entsprechenden Vorschrift liefert genau einen Zahlenwert, den man den Meßwert der Observablen nennt.

2. Ein physikalisches System wird beschrieben durch die Observablen, die an dem System gemessen werden können, und durch die zwischen den Meßwerten dieser Observablen bestehenden Relationen. Die Relationen können entweder die Form haben $\alpha = f(\beta, \gamma, \ldots)$, wobei $\alpha, \beta, \gamma, \ldots$ die Meßwerte der Observablen $A, B, C, \ldots$ sind (klassische Systeme), oder sie lauten $\langle A \rangle = f(\beta, \gamma, \ldots)$, wobei $\langle A \rangle$ der Erwartungswert der Observablen A ist für den Fall, daß $B, C, \ldots$ zu $\beta, \gamma, \ldots$ bestimmt wurden (Quantensysteme). Im klassischen Fall kann man bekanntlich vermöge dieser Relationen die Meß-

* Neue Adresse: Technische Hochschule Aachen.

[1] Kölner Dissertation in gekürzter Fassung.

[2] L. BRILLOUIN, Science and Information Theory, Academic Press, New York 1956.

[3] L. BERGER, Helv. Phys. Acta **31**, 159 [1958].

[4] E. T. JAYNES, Phys. Rev. **106**, 620 [1957]; **108**, 171 [1957].

werte sämtlicher Observablen eines Systems durch die Meßwerte der kanonischen Observablen ausdrücken.

3. Bei der Realisierung von Meßwerten spricht man von Ereignissen. Ein Ereignis heißt ein einfaches Ereignis, wenn dabei jede der in Frage kommenden Observablen einen ganz bestimmten Meßwert annimmt. Ereignisse, wo die Meßwerte nur in einer gewissen Teilmenge aller möglichen Meßwerte enthalten sein müssen, heißen zusammengesetzte Ereignisse. Ereignisse lassen sich zu vollständigen Disjunktionen zusammenfassen, so daß jeder Meßprozeß genau ein Ereignis der Disjunktion ergibt. Ein wichtiger Begriff ist die elementare Disjunktion; sie soll definiert sein als eine solche vollständige Disjunktion, die keine zusammengesetzten Ereignisse enthält.

4. Ein Beobachter, so wie er in den folgenden Überlegungen vorkommt, ist im physikalischen Sinne definiert durch Angabe der Observablen, die er messen kann. In diesem eng umgrenzten aber genau festgelegten Sinne kann auch ein selbsttätig arbeitendes Meßinstrument als Beobachter fungieren.

Zwischen Beobachter und System stellt die Informationstheorie nun eine quantitative Beziehung her, indem sie gestattet, ein zahlenmäßig angebbares Maß für die Information eines Beobachters über ein System einzuführen. Wir wollen die entsprechende Formel [5] von SHANNON aber nicht einfach übernehmen, sondern die Hypothesen einzeln formulieren, die hinreichende Bedingungen zur Ableitung der SHANNON-Formel sind. Der Zahlenwert für die Information, die ein Beobachter bei einer Messung gewinnt, wird abhängen müssen erstens von bereits vorher am System durchgeführten Messungen, zweitens von der Art und dem Ergebnis der betrachteten Messung.

Seien A, B, C Observable des Systems. Es sei A mit dem Ergebnis α bereits früher gemessen. Mißt der Beobachter anschließend B mit dem Ergebnis β, so soll diesem Vorgang der Informationsgewinn $I(A\,\alpha \,|\, B\,\beta)$ zugeordnet sein. Entsprechend sind $I(A\,\alpha, B\,\beta \,|\, C\,\gamma)$ und $I(A\,\alpha \,|\, B\,\beta, C\,\gamma)$ definiert für die Fälle, daß zuerst A und B, dann C bzw. zuerst A, dann B und C gemessen werden, wobei A, B, C als gleichzeitig meßbar vorausgesetzt werden.

Es erscheint dann plausibel, folgendes Postulat aufzustellen:

$$I(A\,\alpha \,|\, B\,\beta, C\,\gamma) = I(A\,\alpha \,|\, B\,\beta) + I(A\,\alpha, B\,\beta \,|\, C\,\gamma). \tag{I, 1}$$

Aus diesem Postulat folgt die Existenz einer Art Zustandsfunktion H, die mit der Information folgendermaßen zusammenhängt:

$$H(A\,\alpha) - H(A\,\alpha, B\,\beta) = I(A\,\alpha \,|\, B\,\beta). \tag{I, 2}$$

H wird man als ein Maß für die Unkenntnis des Beobachters zu deuten haben, da es bei einem Meßprozeß um so stärker abnimmt, je größer die Information ist. Die Größe H heißt die informationstheoretische Entropie. Als ein Maß der Unkenntnis des Beobachters muß H gewisse Eigenschaften besitzen, die als Axiome formuliert zur Berechnung von H hinreichen, sofern es sich um Systeme mit nur endlich vielen beobachtbaren Ereignissen handelt [6].

Die allgemeinste Art von Kenntnissen besteht in der Angabe von Wahrscheinlichkeiten für jedes mögliche Ereignis. Alle diese Wahrscheinlichkeiten lassen sich zurückführen auf eine Wahrscheinlichkeitsverteilung über der elementaren Disjunktion mit den laut Voraussetzung endlich vielen einfachen Ereignissen ξ_i.

Die genannten Axiome lauten dann:

1) H ist eine Funktion der Wahrscheinlichkeiten $w_1, \ldots, w_n \equiv \{w_i\}$, die zu den Ereignissen $\xi_1, \ldots, \xi_n$ gehören;

2) $H(w_1 \ldots w_i \ldots w_k \ldots w_n) = H(w_1 \ldots w_k \ldots w_i \ldots w_n)$;

3) $H(1, 0, \ldots, 0) = 0$;

4) $H(1/n, \ldots, 1/n) \geqq H(\{w_i\})$;

5) $H(w_1, \ldots, w_n, 0) = H(w_1, \ldots, w_n)$;

6) $\sum\limits_k w_k [H(\{w_{ij}\}) - H(\{w_j(k)\})] = H(\{w_i\})$.

Dabei bedeuten in Axiom 6:

$\{w_{ij}\}$ Satz der Wahrscheinlichkeiten für das zweifach indizierte Ereignis ξ_{ij}, das z. B. in der Messung von A und B mit den Resultaten α_i und β_j besteht.

$w_i = \sum\limits_j w_{ij}$ Wahrscheinlichkeit für das Ereignis ξ_i, das aus der Vereinigung aller ξ_{ij} mit festem i besteht.

[5] C. SHANNON u. W. WEAVER, The Mathematical Theory of Communication, University of Illinois Press 1949.

[6] A. J. CHINTSCHIN, in „Arbeiten zur Informationstheorie I“, Mathematische Forschungsberichte, Berlin 1957.

$w_j(i) = w_{ij}/w_i$ bedingte Wahrscheinlichkeit für das Ereignis ξ_{ij}, wenn ξ_i bereits eingetreten ist.

Die Axiome 1 bis 5 enthalten ziemlich selbstverständliche Forderungen. Anders ist das bei Axiom 6. Es besagt, betrachtet man es zusammen mit (I, 2), daß die Information, die durch Messung des Merkmals mit Index i gewonnen wird, im Mittel mit der Entropie der i-Verteilung übereinstimmen soll.

Aus den Axiomen folgt die bekannte SHANNON-Formel[7]:

$$H(\{w_i\}) = -k \sum_i w_i \ln w_i \,. \qquad \text{(I, 3)}$$

Die Konstante $k > 0$ bleibt offen; ihre Wahl ist eine Frage der Einheiten[8]. Sind alle $w_i = 1/n$, dann wird

$$H = k \ln n \,. \qquad \text{(I, 4)}$$

II. Subjektive Begründung der statistischen Mechanik

Die statistische Mechanik begründen heißt eine Vorschrift zur Festlegung von a priori-Wahrscheinlichkeiten angeben. Eine solche Vorschrift ist niemals ganz willkürfrei, sie kann nur plausibel gemacht werden. Das subjektive Verfahren bringt das besonders deutlich zum Ausdruck, indem es auf die Quasi-Ergodenhypothese, die eine Aussage über das tatsächliche Verhalten physikalischer Systeme machen will, ganz verzichtet. Die Funktion der Quasi-Ergodenhypothese übernimmt eine Regel zur Verarbeitung von Informationen.

Gegeben sei ein Beobachter, der Messungen an einem System ausführt. Die Information des Beobachters bestehe darin, daß er den Meßwert α der Observablen A gefunden hat. Um das Informationsmaß für die durch diese Messung gewonnene Kenntnis anzugeben, muß man die Entropie vor und nach der Messung kennen. Die Entropie war aber als Funktion der Wahrscheinlichkeiten über der elementaren Disjunktion definiert. Diese Elementarwahrscheinlichkeiten liegen zunächst jedoch noch gar nicht fest. Wir wollen vereinbaren, daß unser Beobachter sie stets so wählt, daß die Entropie möglichst groß wird. Da die Entropie die Unkenntnis des Beobachters mißt, heißt das, daß seine Schlüsse aus der A-Messung so vorsichtig wie nur irgend möglich gezogen sind. Die Vorschrift, die Entropie stets unter Einhaltung der durch alle gegebenen Kenntnisse geforderten Nebenbedingungen zum Maximum zu machen, reicht schon aus zur Begründung der statistischen Mechanik, wie die folgenden Betrachtungen lehren werden.

Wir zeigen das am Beispiel eines klassischen Systems mit f Freiheitsgraden im stationären Fall. Bei allen folgenden Betrachtungen wird primär stets an eine Einteilung des Phasenraumes in abzählbar viele Zellen gedacht, was der Tatsache entspricht, daß jeder Beobachter auf Grund seiner Meßgenauigkeit nur endlich viele Fälle unterscheiden kann, woraus man durch Idealisierung dann abzählbar unendlich viele Fälle macht. Wo es praktisch ist, gehen wir daneben ohne weiteres zu stetig verteilten Größen über. Die elementare Disjunktion wird in unserem Beispiel aufgespannt durch die Zellen des Phasenraumes, festgelegt durch die kanonischen Variablen $q_1, \ldots, q_f,\ \ p_1, \ldots, p_f$. Für die Wahrscheinlichkeitsdichte gilt nach LIOUVILLE die Gleichung

$$\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}t} = \sum_{\nu=1}^{f} \left(\frac{\partial w}{\partial q_\nu} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\nu} - \frac{\partial w}{\partial p_\nu} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_\nu} \right) \equiv [w, \mathcal{H}], \qquad \text{(II, 1)}$$

wobei $\mathcal{H}$ die HAMILTON-Funktion bedeutet. Soll das System stationär sein, dann müssen alle Wahrscheinlichkeiten zeitlich konstant sein, so daß die POISSON-Klammer (II, 1) verschwinden muß. w kann dann nur von den Konstanten der Bewegung abhängen. Davon fallen Impuls und Drehimpuls weg, wenn das System als Ganzes in Ruhe ist. Dann hängt w noch von der Energie und den $2f-7$ weiteren Konstanten der Bewegung ab. Wir schreiben

$$w = w_E \cdot w_{E\,|\,c_8 \ldots c_{2f}} \qquad \text{(II, 2)}$$

als Produkt aus der Wahrscheinlichkeit w_E, die Energie zu finden, und der bedingten Wahrscheinlichkeit $w_{E\,|\,c_8 \ldots c_{2f}}$, dazu die übrigen Bewegungskonstanten $c_8 \ldots c_{2f}$ zu finden. Die gesamte Entropie wird nach Axiom 6

$$H = -\sum_E w_E \ln w_E + \sum_E w_E \, H(\{w_{E\,|\,c_8 \ldots c_{2f}}\}) \,. \qquad \text{(II, 3)}$$

Im allgemeinen weiß der Beobachter nichts über die Werte $c_8 \ldots c_{2f}$. Dann unterliegen die $w_{E\,|\,c_8 \ldots c_{2f}}$ keinen einschränkenden Bedingungen und H muß

[7] Der Beweis findet sich bei CHINTSCHIN, l. c. [6], S. 12 ff.

[8] Die informationstheoretische Einheit „bit" ist definiert durch $k = 1/\ln 2$. In der Thermodynamik wird k die BOLTZMANN-Konstante. Wir wollen stets $k = 1$ und dimensionslos annehmen.

maximal gemacht werden, indem die

$$w_{E\,|\,c_8\ldots c_{2f}} = \frac{1}{n_E} \qquad \text{(II, 4)}$$

gesetzt werden, wobei n_E die Zahl der Zustände bedeutet, die zur Energie E gehören. Aus (II, 2) und (II, 4) folgt dann, daß die Wahrscheinlichkeiten nur von der Energie abhängen. Die Wahrscheinlichkeit, das System in der i-ten Zelle seines Phasenraumes zu finden, läßt sich daher darstellen als

$$w_i = w_i(\mathcal{H}_i), \qquad \text{(II, 5)}$$

wobei $\mathcal{H}_i$ etwa den Mittelwert der HAMILTON-Funktion in der Zelle bedeuten kann. Kennt der Beobachter den genauen Wert der Energie des Systems, dann liegt der Fall vor, wie er durch die mikrokanonische Gesamtheit beschrieben wird.

Ist das System zerlegbar in N Teilsysteme, deren Wechselwirkung vernachlässigt werden kann, dann hat man einen Fall von der Art des idealen Gases vor sich. Die Gesamtenergie setzt sich additiv zusammen aus den Energien der Teilsysteme

$$E = \sum \varepsilon_j .$$

Die Entropie des Gesamtsystems sei H. Nun greifen wir eines der Teilsysteme heraus und nennen w_ν die Wahrscheinlichkeit, daß es in der ν-ten Zelle seines Phasenraumes mit der Energie ε_ν liegt. Nach Axiom 6 ist dann

$$H = \sum_\nu w_\nu H_\nu - \sum_\nu w_\nu \ln w_\nu . \qquad \text{(II, 6)}$$

H_ν bedeutet dabei die Entropie des Restsystems für den Fall, daß das Teilsystem im Zustand ν angetroffen wurde. Nun ist aber H so zu bestimmen, daß es ein Maximum bei Einhaltung aller Nebenbedingungen wird. Denken wir uns alle H_ν schon festgelegt. Um H maximal zu machen, verfügen wir nur noch über die w_ν. An Nebenbedingungen haben wir $\Sigma\, w_\nu = 1$ zu beachten. Differenziert man $H - \varkappa\, \Sigma\, w_\nu$ nach w_ν und setzt das Ergebnis gleich Null, dann folgt

$$H_\nu - \ln w_\nu - 1 - \varkappa = 0 \qquad \text{(II, 7)}$$

und daraus wegen der Nebenbedingung

$$w_\nu = \exp(H_\nu) \big/ \sum_\mu \exp(H_\mu) . \qquad \text{(II, 8)}$$

Ist das System stationär, dann hängt w_ν nur von ε_ν ab. Das sieht man so ein:

Sei $\tilde{w}$ die Wahrscheinlichkeit eines Zustandes des großen Gesamtsystems mit der HAMILTON-Funktion

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1(q_1, \ldots, p_f) + \mathcal{H}_2(Q_1, \ldots P_F) + \mathcal{H}_{12}(q_1, \ldots, p_f,\ Q_1, \ldots, P_F). \qquad \text{(II, 9)}$$

Die Phasenraumwahrscheinlichkeit des Teilsystems wird

$$w = \int \mathrm{d}Q_1, \ldots, \mathrm{d}P_F\, \tilde{w}(q_1, \ldots, P_F)$$

und es gilt, wenn $\mathcal{H}_{12}$ vernachlässigbar ist, wie vorausgesetzt,

$$\dot{\tilde{w}} = \sum_i \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial p_i} - \frac{\partial \tilde{w}}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial q_i} \right) + \sum_j \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial Q_j} \frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial P_j} - \frac{\partial \tilde{w}}{\partial P_j} \frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial Q_j} \right); \qquad \text{(II, 10)}$$

durch Integration über die Variablen des Restsystems folgt

$$\dot{w} = \sum_i \left(\frac{\partial w}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial p_i} - \frac{\partial w}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial q_i} \right), \qquad \text{(II, 11)}$$

wobei der Oberflächenbeitrag des zweiten Gliedes von (II, 10) verschwindet, weil $\tilde{w}$ im Unendlichen verschwinden muß. Aus der Stationarität folgt aber $\dot{\tilde{w}} = 0$, also auch $\dot{w} = 0$. Ganz entsprechende Überlegungen, wie sie zur Herleitung von (II, 5) angestellt wurden, führen jetzt auf die Beziehung

$$w = f(\mathcal{H}_1). \qquad \text{(II, 12)}$$

Mit (II, 8) folgt daraus

$$H_\nu = g(\varepsilon_\nu).$$

Für große N ist aber H_ν sehr wenig verschieden von H, welches seinerseits nur von E und N abhängt. Daher ist H_ν in guter Näherung darstellbar durch

$$H_\nu = H(N-1, E-\varepsilon_\nu) = H(N, E) - \partial H/\partial N - \varepsilon_\nu (\partial H/\partial E), \qquad \text{(II, 13)}$$

woraus mit den Abkürzungen

$$\varkappa = \frac{\partial H}{\partial N} - H; \quad \lambda = \partial H/\partial E \qquad \text{(II, 14)}$$

folgt: $$H_\nu = -\varkappa - \lambda\, \varepsilon_\nu . \qquad \text{(II, 15)}$$

Damit erhält man aus (II, 8) die bekannte Verteilung

$$w_\nu = \exp(-\lambda\, \varepsilon_\nu) \big/ \sum_\mu \exp(-\lambda\, \varepsilon_\mu) . \qquad \text{(II, 16)}$$

Einen etwas anderen Aspekt kann man den Formeln noch abgewinnen, wenn man (II, 15) in (II, 6) einträgt. Man erhält dabei

$$H = -\varkappa \sum_\nu w_\nu - \lambda \sum_\nu w_\nu\, \varepsilon_\nu - \sum_\nu w_\nu \ln w_\nu . \qquad \text{(II, 17)}$$

Die Entropie in (II, 6) war als unbestimmte Größe aufzufassen, die durch geeignete w_ν zum Maximum gemacht werden sollte. Wendet man diese Vorschrift jetzt auf (II, 17) an, dann kann man sie auch so lesen, daß man sagt $-\sum_\nu w_\nu \ln w_\nu$ sei zum Maximum zu machen, wobei zwei Nebenbedingungen der Form

$$\sum w_\nu = 1 ; \quad \sum_\nu w_\nu \, \varepsilon_\nu = \langle \varepsilon \rangle \tag{II, 18}$$

zu beachten sind. Man wird dann die mit H gleichfalls unbestimmten Größen $\varkappa$ und λ als LAGRANGE-Parameter interpretieren. Von einem derartigen Extremalprinzip geht JAYNES in der schon zitierten Arbeit aus. Es bedeutet aber eine gewisse Schwierigkeit, zu verstehen, wieso a priori-Kenntnisse statt auf scharfen Meßwerten auf Erwartungswerten basieren sollen, eine Voraussetzung, die man machen muß, wenn man (II, 17) und (II, 18) an die Spitze stellt.

Um den Anschluß an die Thermodynamik zu vollziehen, muß man noch die Größe λ in (II, 16) mit der Temperatur in Verbindung bringen. Hat man zwei beliebige Systeme untereinander und mit einem großen System (Thermostat) in schwacher Wechselwirkung, dann ergibt Axiom 6, wenn μ, ν die Zustände der beiden Systeme numerieren,

$$H = -\sum_{\mu,\nu} w_{\mu\nu} \ln w_{\mu\nu} + \sum_{\mu\nu} w_{\mu\nu} H_{\mu\nu} \tag{II, 19}$$

und daraus erhält man wegen der Extremalbedingung wie bei (II, 8)

$$w_{\mu\nu} \sim \exp(H_{\mu\nu}) . \tag{II, 20}$$

Aus der Stationarität folgt nach den schon einmal angestellten Überlegungen jetzt, daß $w_{\mu\nu}$ eine Funktion der Energie $\varepsilon_\mu + \varepsilon_\nu$ ist. Das gleiche gilt dann auch für $H_{\mu\nu}$. Wegen der Größe des Thermostaten wird $H_{\mu\nu}$ wenig von H abweichen. Wir schreiben

$$H_{\mu\nu} = H - \lambda(\varepsilon_\mu + \varepsilon_\nu) . \tag{II, 21}$$

Einsetzen von (II, 21) in (II, 20) ergibt

$$w_{\mu\nu} \sim \exp(-\lambda\,\varepsilon_\mu) \cdot \exp(-\lambda\,\varepsilon_\nu) . \tag{II, 22}$$

Für jedes der Systeme hat man daher eine Verteilung der Form

$$w_\mu \sim \exp(-\lambda\,\varepsilon_\mu) \tag{II, 23}$$

anzusetzen. Daraus liest man leicht den allgemeinen Satz ab, daß alle Systeme, die untereinander und mit einem Thermostaten in Kontakt stehen, nach (II, 23) verteilt sind, wobei λ für alle den gleichen Wert annimmt. In üblicher Weise schließt man daraus $\lambda = 1/k\,T$ und kann alle aus der thermodynamischen Statistik bekannten Überlegungen anstellen.

Das Resultat ist, daß für stationäre und abgeschlossene klassische Systeme das informationstheoretisch begründete Postulat der maximalen Entropie auf die thermodynamische Statistik führt. Insbesondere ergibt sich in diesem Falle die Identität von informationstheoretischer und thermodynamischer Entropie. Daß eine subjektiv begründete Methode zu objektiv präzisen Resultaten führt, hat seinen Grund natürlich in den bekannten Eigenschaften der großen Zahlen, die gewährleisten, daß selbst die vorsichtigste Schätzung einer praktisch sicheren Aussage gleichkommt [4].

III. Quantensysteme

Die Übertragung der bisherigen Überlegungen auf Quantensysteme birgt keine besonderen Schwierigkeiten. Die allgemeine Definition der elementaren Disjunktion bleibt anwendbar, nur hat man die Existenz komplementärer Größen zu berücksichtigen. Das bedingt, daß jedem Achsensystem des vollständigen HILBERT-Raumes eine elementare Disjunktion entspricht. Die allgemeinste Darstellung eines Zustandes ist bekanntlich die Dichtematrix [9]. Diese enthält genau so viele nicht durch die quantenmechanischen Eigenschaften des Systems festgelegte Parameter, wie die elementare Disjunktion Fälle zuläßt. Es sind die Eigenwerte w_ν der Dichtematrix. Für sie gilt

$$\sum w_\nu = 1 \quad \text{und} \quad w_\nu \geqq 0 . \tag{III, 1}$$

Schreibt man die Dichtematrix mittels Projektionsoperatoren

$$\varrho = \sum_\nu w_\nu P_\nu , \tag{III, 2}$$

dann wird die Wahrscheinlichkeit, das System in einem beliebigen Zustand zu finden, der durch den Projektor Q_λ beschrieben wird,

$$v_\lambda = \mathrm{Sp}(\varrho\, Q_\lambda) = \sum_\nu w_\nu\, p_{\nu\lambda} ; \quad p_{\nu\lambda} = \mathrm{Sp}(P_\nu\, Q_\lambda) . \tag{III, 3}$$

Hat man einen vollständigen orthogonalen Satz solcher Q_λ, definiert durch die Eigenschaften

$$Q_\lambda\, Q_{\lambda'} = Q_\lambda\, \delta_{\lambda\lambda'} , \quad \sum_\lambda Q_\lambda = 1 , \tag{III, 3 a}$$

[9] U. FANO, Rev. Mod. Phys. **29**, 74 [1957]. Die Arbeit enthält eine Übersicht über die wichtigsten Eigenschaften der Dichtematrix.

dann gehört zu diesem Satz eine elementare Disjunktion. Nun definieren wir zu jeder elementaren Disjunktion eine Entropie, also z. B.

$$H_w = -\sum_\lambda w_\nu \ln w_\nu; \qquad H_v = -\sum_\nu v_\lambda \ln v_\lambda. \quad \text{(III, 4)}$$

H_w ist unter allen so gebildeten Entropiegrößen durch drei Eigenschaften ausgezeichnet:

1. Es hängt nicht von den durch die quantenmechanischen Eigenschaften bestimmten $p_{\nu\lambda}$ ab, sondern nur von den w_ν, die allein durch die Anfangsinformation festgelegt sind.
2. Es existiert die invariante Darstellung
$$H_w = -\operatorname{Sp}(\varrho \ln \varrho). \quad \text{(III, 5)}$$
3. Es gilt $H_w \leqq H_v$ für beliebige Disjunktion und Verteilung v_λ. (III, 6)

Eigenschaft 1 und 2 sind ohne weiteres klar, die dritte Eigenschaft läßt sich beweisen, indem man zeigt, daß unter allen Dichtematrizen mit gleichen Diagonalelementen v_λ $(\lambda = 1, \ldots, n)$ diejenige den Ausdruck $-\operatorname{Sp}(\varrho \ln \varrho)$ zum Maximum macht, deren außerdiagonale Elemente verschwinden. Daraus folgt nämlich

$$H_w = -\operatorname{Sp}(\varrho \ln \varrho) \leqq -\sum_\lambda v_\lambda \ln v_\lambda = H_v. \quad \text{(III, 7)}$$

Um das Extremalproblem

$$-\operatorname{Sp}(\varrho \ln \varrho) = \text{Max}. \quad \text{(III, 8)}$$

mit den Nebenbedingungen

$$\operatorname{Sp}(\varrho\, Q_\lambda) = v_\lambda \quad \text{(III, 8 a)}$$

zu lösen, machen wir den Variationsansatz

$$\varrho = \varrho_0 + \delta\eta \quad \text{(III, 9)}$$

mit einem spurfreien aber sonst beliebigen Operator η. Dann ist die Bedingung für ein Extremum, daß die erste Näherung in δ für den folgenden Ausdruck verschwindet:

$$-\operatorname{Sp}[(\varrho_0 + \delta\eta) \ln(\varrho_0 + \delta\eta)] - \sum_\lambda \mu_\lambda \operatorname{Sp}[Q_\lambda(\varrho_0 + \delta\eta)]. \quad \text{(III, 10)}$$

Um den Logarithmus in (III, 10) durch eine Potenzreihe ausdrücken zu können, schreibt man

$$\ln(\varrho_0 + \delta\eta) = \ln(1 + \varrho_0 - 1 + \delta\eta). \quad \text{(III, 10 a)}$$

Nun denkt man sich in (III, 10) die Entwicklung durchgeführt; dabei erhält man als lineares Glied in δ, welches verschwinden muß

$$\operatorname{Sp}\left[\mu\left(\ln \varrho_0 + \sum_\lambda \mu_\lambda Q_\lambda\right)\right]. \quad \text{(III, 11)}$$

Da η ein beliebiger Operator ist, folgt daraus

$$\varrho_0 = \exp\left(-\sum_\lambda \mu_\lambda Q_\lambda\right) = \sum_\lambda v_\lambda Q_\lambda; \quad v_\lambda = \exp(-\mu_\lambda). \quad \text{(III, 12)}$$

Ein Extremum liegt also nur dann vor, wenn ϱ durch die Q_λ allein dargestellt wird, das heißt aber, daß es nur die Diagonalelemente v_λ besitzt.

Daß das Extremum ein Maximum ist, kann man durch Erweitern der Diagonalmatrix

$$\varrho_0 = \sum v_\lambda Q_\lambda \equiv \sum_\lambda \varrho_{\lambda\lambda} Q_\lambda, \quad \text{(III, 13)}$$

um die zwei Elemente ϱ_{12} und $\varrho_{21} = \varrho_{12}{}^*$ zu ϱ_1 zeigen. Nun bildet man

$$-\operatorname{Sp}(\varrho_1 \ln \varrho_1) = -\operatorname{Sp}(\varrho_0 \ln \varrho_0) - \delta_1$$

und findet durch Anwendung des Entwicklungsverfahrens nach (III, 10 a)

$$\delta_1 = \sum_n \frac{1}{n} \sum{}' \varrho_{\nu\mu}\, \varrho_{\mu\lambda} \ldots \varrho_{\tau\nu} > 0, \quad \text{(III, 14)}$$

Σ' bedeutet n Faktoren mit allen Werten

$$\nu, \mu, \ldots, \tau = 1, 2.$$

Die damit bewiesenen drei Eigenschaften von H_w lassen diese Größe als das einzig vernünftige Maß für die Unkenntnis eines Beobachters über das durch ϱ beschriebene System erscheinen. Als Regel für die Zustandsbestimmung bei unvollständiger Kenntnis legt man jetzt genau wie bei klassischen Systemen fest, daß H_w unter Beachtung aller dem Problem entsprechenden Nebenbedingungen maximal gemacht werden soll.

Man kann die Argumentation für stationäre Systeme aus dem vorigen Abschnitt teilweise wörtlich übernehmen, wenn man unter $\mathcal{H}$ den HAMILTON-Operator versteht und POISSON-Klammern durch Kommutatoren ersetzt. So folgt aus der Bedingung

$$[\varrho, \mathcal{H}] = 0, \quad \varrho = \sum_\nu w_\nu P_\nu, \quad \text{(III, 15)}$$

wobei P_ν auf den Zustand mit der Energie E_ν projiziert. Bei Kenntnis von $E = E_0$ hat man wieder die mikrokanonische Gleichverteilung

$$\varrho = \frac{1}{N} \sum P_\nu, \quad \text{(III, 16)}$$

wo die Summation über alle Zustände mit $E_\nu = E_0$ zu erstrecken ist. Die Zerlegung in Thermostat und

Teilsysteme, auf der der Anschluß an den Temperaturbegriff aufgebaut werden konnte, läßt sich auch bei den Quantensystemen durchführen, wenn man nur beachtet, daß die Voraussetzung der schwachen Wechselwirkung auch die Austauschglieder mitumfassen muß. Dann lautet, wenn P_ν und Q_μ die Projektoren auf die Zustände des kleinen bzw. großen Systems sind, die Dichtematrix

$$\varrho = \sum_{\nu\mu} w_{\nu\mu} P_\nu Q_\mu . \qquad \text{(III, 17)}$$

Die Dichtematrix des Teilsystems ist

$$\varrho_1 = \mathrm{Sp}_Q\, \varrho = \sum_{\nu\mu} w_{\nu\mu} P_\nu = \sum_\nu w_\nu' P_\nu . \qquad \text{(III, 18)}$$

Axiom 6 lautet dann

$$H_{\text{gesamt}} = -\sum_\nu w_\nu' \ln w_\nu' + \sum_\nu w_\nu' H_\nu , \qquad \text{(III, 19)}$$

woraus wieder folgt

$$w_\nu' \sim \exp(H_\nu) . \qquad \text{(III, 20)}$$

Ganz entsprechend wie früher schließt man, daß H_ν nur von dem Energieeigenwert ε_ν abhängt, so daß gilt

$$\varrho_1 \sim \sum \exp(-\lambda\, \varepsilon_\nu)\, P_\nu = \exp(-\lambda\, \mathcal{H}) \qquad \text{(III, 21)}$$

letzteres wegen $\mathcal{H} = \sum_\nu \varepsilon_\nu P_\nu .$ (III, 22)

Analog zu dem bei klassischen Systemen dargelegten Verfahren kann man aus (III, 19) auch das Extremalproblem mit Nebenbedingungen formulieren

$$-\mathrm{Sp}(\varrho_1 \ln \varrho_1) = \text{Max.}; \qquad \mathrm{Sp}\, \varrho_1 = 1;$$
$$\mathrm{Sp}(\varrho_1 \mathcal{H}) = \langle \varepsilon \rangle . \qquad \text{(III, 23)}$$

Die Anwendbarkeit der Regel von der maximalen Entropie beschränkt sich nicht auf solche Nebenbedingungen, wie sie in (III, 23) vorkommen. Das Resultat jeder beliebigen Messung, welches als Nebenbedingung denkbar ist, läßt sich mit Hilfe geeigneter Operatoren A_j immer als Spur ausdrücken

$$\mathrm{Sp}(A_j\, \varrho_1) = \alpha_j , \qquad \text{(III, 24)}$$

so daß man auf ein Problem wie in (III, 8) geführt wird. Die Lösung lautet daher

$$\varrho_1 \sim \exp(-\sum_j \lambda_j A_j) . \qquad \text{(III, 25)}$$

Altbekannt ist das Beispiel, wo ein A_j der Teilchenzahloperator ist. Neuerdings hat man in der Theorie der Supraleitung eine solche Beschreibung mit A_j als Stromoperator diskutiert.

IV. Irreversibilität

In der Einleitung war es als ein Vorzug der subjektiven Deutung bezeichnet worden, daß sie allgemeiner sei als die objektive und insbesondere das Nebeneinanderbestehen einer reversiblen mechanischen und einer irreversiblen thermodynamischen Beschreibung ein und desselben Prozesses verständlich erscheinen lasse.

Bekanntlich ist die Entropie, wie sie gewöhnlich definiert wird, invariant unter der Transformation durch die Bewegungsgleichungen für abgeschlossene Systeme. Für den quantenmechanischen Ausdruck (III, 5) ist das eine Trivialität, wenn man im HEISENBERG-Bild rechnet; in der klassischen Physik folgt die Behauptung aus dem LIOUVILLEschen Satz. Das steht im Widerspruch zum Befund der Thermodynamik. Wenn unsere Auffassung von der statistischen Mechanik brauchbar sein soll, sollte es mit ihrer Hilfe möglich sein, diesen Widerspruch als scheinbar aufzulösen. Wir wollen das jetzt am Beispiel eines sehr allgemeinen klassischen Systems formulieren.

Die elementare Disjunktion des Systems sei durch zwei Merkmale ξ, η festgelegt. Ein Beobachter $B^{(1)}$ mache Messungen an dem System. $B^{(1)}$ sei imstande, ξ und η zu messen. Zur Zeit t_0 mache er eine Messung, die ihn eine Verteilung $w_{i\nu}^{(1)}(t_0)$ für die Ereignisse ξ_i, η_ν annehmen läßt. Die Verteilung zur Zeit t_1 wird dann

$$w_{j\mu}^{(1)}(t_1) = \sum_{i\nu} w_{i\nu}^{(1)}(t_0)\, p_{i\nu|j\mu} , \qquad \text{(IV, 1)}$$

wobei die $p_{i\nu|j\mu}$ die Übergangswahrscheinlichkeiten vom Zustand ξ_i, η_ν zum Zustand ξ_j, η_μ sind. Wenn alle $p_{i\nu|j\mu}$ entweder 1 oder 0 sind, wollen wir von LIOUVILLEschen Wahrscheinlichkeiten sprechen wegen der Beziehung zum LIOUVILLEschen Satz. Nehmen wir an, die $p_{i\nu|j\mu}$ seien LIOUVILLEsche Wahrscheinlichkeiten, dann folgt

$$H^{(1)}(t_1) = -\sum_{j\mu} w_{j\mu}^{(1)}(t_1) \ln w_{j\mu}^{(1)}(t_1) \qquad \text{(IV, 2)}$$
$$= -\sum_{i\nu} w_{i\nu}^{(1)}(t_0) \ln w_{i\nu}^{(1)}(t_0) = H^{(1)}(t_0),$$

weil in diesem Fall aus jedem $w_{i\nu}^{(1)}(t_0)$ ein und nur ein $w_{j\mu}(t_1)$ folgt.

Nun gebe es einen zweiten Beobachter $B^{(2)}$, der im Gegensatz zu $B^{(1)}$ das Merkmal η nicht messen kann. Dieser Beobachter wird die Ausgangssituation nur durch Wahrscheinlichkeiten $w_i^{(2)}$ beschreiben können. Als Bewegungsgesetz findet er die Übergangswahrscheinlichkeiten

$$p_{i|j} = \sum_{\nu, \mu} w_{i|\nu} \, p_{i\nu|j\mu} \, . \qquad \text{(IV, 3)}$$

Die bedingten Wahrscheinlichkeiten $w_{i|\nu}$, η_ν zu finden, wenn ξ_i gegeben ist, sollen dabei nicht vom LIOUVILLE-Typ sein, denn sonst wäre η gar kein selbständiges Merkmal. Dann bilden aber auch die $p_{i|j}$ keinen LIOUVILLE-Satz. Das Bewegungsgesetz, mit dem $B^{(2)}$ zu rechnen hat, lautet

$$w_j^{(2)}(t_1) = \sum_i w_i^{(2)}(t_0) \; p_{i|j} \, . \qquad \text{(IV, 4)}$$

Vergleicht man mit (III, 6), dann erkennt man, daß jetzt gelten muß

$$H^{(2)}(t_1) = -\sum_j w_j^{(2)}(t_1) \ln w_j^{(2)}(t_1) \geqq H^{(2)}(t_0)$$

$$= -\sum_i w_i^{(2)}(t_0) \ln w_i^{(2)}(t_0) \, . \qquad \text{(IV, 5)}$$

Die Voraussetzung, daß die $p_{i|j}$ keinen LIOUVILLE-Satz bilden sollen, schließt noch das Gleichheitszeichen in (IV, 5) aus und ergibt die Eigenschaft der Irreversibilität

$$H^{(2)}(t_1) > H^{(2)}(t_0) \, . \qquad \text{(IV, 6)}$$

Anschaulich kann man das Resultat so formulieren:

Die strengen Bewegungsgleichungen abgeschlossener Systeme zerstören keine Information, sie verlagern sie nur innerhalb des Systems. Dem mechanischen Beobachter $B^{(1)}$, der alle Merkmale des Systems messend verfolgen kann, steht sämtliche Information, die er am Anfang durch Messungen gewonnen hatte, jederzeit wieder zur Verfügung. Er könnte diese Information zum Beispiel benützen, um dem System alle kontrolliert zugeführte Energie zu entziehen. Für ihn gibt es daher nicht das Problem des Perpetuum mobile zweiter Art. Der thermodynamische Beobachter $B^{(2)}$ hingegen mit seinen begrenzten Meßmöglichkeiten verliert im allgemeinen etwas von seiner Anfangsinformation, weil sich ein Teil davon zu einem späteren Zeitpunkt als Information über Merkmale wiederfindet, die ihm nicht zugänglich sind. Aus der Perspektive dieses Beobachters betrachtet zeigt das System ein Rauschen als Einfluß der unzugänglichen Teile und es gelten die stochastischen Bewegungsgleichungen (IV, 4). Als Beispiel ist sowohl der Fall denkbar, daß der unbekannte Teil des Systems sozusagen im Inneren liegt — vergleiche hierzu etwa die Diskussion über die Entropie der Grobverteilung bei TER HAAR [10] — als auch der Fall einer Ankoppelung an ein äußeres Wärmebad. Das führt auf die Theorie der stationären irreversiblen Prozesse [11].

Zu danken hat der Verfasser seinem Lehrer, Herrn Prof. Dr. F. SAUTER, für mannigfache Förderung, sowie Herrn Prof. Dr. F. SCHLÖGL für zahlreiche klärende Diskussionen.

[10] Eine umfassende Diskussion über das Problem enthält die Arbeit von D. TER HAAR, Rev. Mod. Phys. **27**, 289 [1955].

[11] Über die dann zuständigen Bewegungsgleichungen vom KRAMERS-Typ vgl. z. B. BERGMANN u. LEBOWITZ, Phys. Rev. **99**, 578 [1955]; J. MEIXNER, Z. Phys. **149**, 624 [1957].