H-Theoreme für die Fokker-Planck-Gleichung[1]

Von B. CRELL, T. DE PALY und A. UHLMANN, Leipzig

1. Einführung

Die stochastischen Prozesse haben in der Physik bei der Modellierung dynamischen Verhaltens eine breite Anwendung erfahren [2, 6].

Wir betrachten ein physikalisches System, dessen Phasenraum Γ bekannt sei. Unter einem Zustand dieses Systems zur Zeit t verstehen wir eine Verteilung $P(x, t) \geqq 0$, wobei x ein Punkt des Phasenraumes Γ ist.

Der Zeitentwicklung der Zustände $P(x, t)$ legen wir einen Markoffschen Prozeß zugrunde. Man erhält dann als Bewegungsgleichung die master equation [2]:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = \int_\Gamma \{W(x - \xi, \xi)\, P(x - \xi, t) - W(x, -\xi)\, P(x, t)\}\, \mathrm{d}\xi. \tag{1}$$

$W(x - \xi, \xi)$ ist die Übergangswahrscheinlichkeit von $x - \xi$ nach x.

Für die master equation gelten die *H-Theoreme von Felderhof und van Kampen* [2, 7]:

> Sind $P(x, t)$ und $Q(x, t)$ zwei beliebige, nichtnegative Lösungen der master equation, so gilt für die Funktionale $H^f(P, Q) = \int_\Gamma Q(x, t) f\left(\frac{P(x, t)}{Q(x, t)}\right) \mathrm{d}x$ mit der konvexen Funktion f
>
> $$\frac{\partial}{\partial t} H^f(P, Q) \leqq 0$$
>
> für jede konvexe Funktion f.

Wir werden zeigen, daß eine solche Familie von H-Theoremen auch für die Fokker-Planck-Gleichung gilt. Formal erhält man die Fokker-Planck-Gleichung aus der master equation [2]. Dazu nehmen wir an, daß $W(x - \xi, \xi)\, P(x - \xi, t)$ mit wachsendem $|\xi|$ genügend schnell abfällt („kleine Sprünge") und nach x hinreichend oft differenziert werden kann. Die Entwicklung der rechten Seite von (1) in eine Potenzreihe nach ξ liefert:

$$\frac{\partial}{\partial t} P = \int_\Gamma \left\{ -\xi_i \partial_i (W(x, \xi)\, P(x, t)) + \frac{1}{2} \xi_i \xi_j \partial_i \partial_j (W(x, \xi)\, P(x, t)) + \dots \right\} \mathrm{d}\xi$$

$\left(\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i},\ x = (x_i),\ \xi = (\xi_i),\ \text{Verwendung der Summenkonvention}\right)$.

Wir beschränken uns auf die Entwicklung bis zur zweiten Ordnung und erhalten mit

$$\alpha_i = \int_\Gamma \xi_i W(x, \xi)\, \mathrm{d}\xi, \qquad \alpha_{ij} = \int_\Gamma \xi_i \xi_j W(x, \xi)\, d\xi$$

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

die *Fokker-Planck-Gleichung:*

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \partial_i \left\{ -\alpha_i(x) P(x, t) + \frac{1}{2} \partial_j (\alpha_{ij}(x) P(x, t)) \right\}. \tag{2}$$

2. *H-Theoreme für die Fokker-Planck-Gleichung*

$\Omega(\Gamma)$ bezeichne die Menge aller Verteilungsfunktionen für ein Gebiet $\Gamma \subset R^n$: $P \in \Omega(\Gamma)$ genau dann, wenn $P(x, t) \geqq 0$ für alle $x \in \Gamma$, $t \geqq 0$. Auf dem Produkt $\Omega(\Gamma) \times \Omega(\Gamma)$ definieren wir für jede konvexe, reelle Funktion f ein Funktional H^f durch

$$H^f(P, Q) = \int_\Gamma Q(x, t) f\left(\frac{P(x, t)}{Q(x, t)}\right) \mathrm{d}x; \quad P, Q \in \Omega(\Gamma), \quad (Q \neq 0).$$

Das zeitliche Verhalten dieser Funktionale H^f soll untersucht werden für den Fall, daß die Verteilungsfunktionen $P, Q \in \Omega(\Gamma)$ Lösungen einer speziellen parabolischen Differentialgleichung – der *Fokker-Planck-Gleichung* – sind:

$$\frac{\partial}{\partial t} P = \partial_i \left\{ -\alpha_i(x) P + \frac{1}{2} \partial_j (\alpha_{ij}(x) P) \right\}, \tag{3}$$

analog für Q und die Matrix $(\alpha_{ij}(x))$ positiv definit für alle $x \in \Gamma$.
Bevor die Sätze über das Verhalten der Ableitung von $H^f(P, Q)$ nach der Zeit formuliert werden, sollen noch einige Bedingungen angegeben werden, die im weiteren stillschweigend vorausgesetzt werden. Wir nehmen an, daß die Koeffizienten, die betrachteten Gebiete und deren Randkurven bzw. Oberflächen derart sind, daß die verwendeten Resultate über die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung der Randwertaufgaben ... gelten. Ohne das zu erwähnen, verweisen wir auf [1].
Für die Lösungen der Differentialgleichung (3) gelten dann die folgenden Resultate:

- Die Lösungen aller im folgenden betrachteten Randwertaufgaben existieren und sind eindeutig.
- Die entsprechenden stationären Lösungen, d. h. Lösungen der Gleichung $\frac{\partial}{\partial t} P_{st} = 0$, existieren und sind eindeutig.
- Der Charakter von P als Verteilungsfunktion bleibt erhalten, d. h., ist zur Zeit t_0 $P(x, t_0) \geqq 0$, so ist auch $P(x, t) \geqq 0$ für $t > t_0$.

Wir formulieren jetzt einige Versionen von H-Theoremen für die Fokker-Planck-Gleichung, die wir im nächsten Kapitel beweisen wollen. Zuerst betrachten wir Lösungen in einem beschränkten Gebiet $\Gamma \subset R^n$, die einer Adiabatenbedingung genügen. Die *Adiabatenbedingung* führt zu einer zweiten Randwertaufgabe und lautet: Die Lösungen P, Q der Gleichung (3) sollen auf dem Rand $\partial\Gamma$ des Gebietes Γ derart sein, daß $u_i \alpha_{ij} \partial_j P = 0$ (entsprechend für Q) auf $\partial\Gamma$, wobei (u_i) der innere Normalenvektor der Berandung $\partial\Gamma$ ist.

Satz 1

P, Q seien Lösungen der Fokker-Planck-Gleichung (3) in einem beschränkten Gebiet $\Gamma \subset R^n$ mit den Anfangswerten $P(x, 0) = P_0(x) \geqq 0$, $Q(x, 0) = Q_0(x) > 0$ für alle $x \in \Gamma$.
Erfüllen P, Q auf dem Rand $\partial\Gamma$ die Adiabatenbedingung und gilt auf ganz $\partial\Gamma$ $\alpha_i u_i = \frac{1}{2} \partial_j \alpha_{ij} u_i$ (was die Abgeschlossenheit des beschriebenen Systems nach sich zieht

– Bemerkung 3 –), so ist

$$\frac{\partial}{\partial t} H^f(P, Q) \leqq 0 \quad \text{für alle konvexen Funktionen } f.$$

Für unbeschränkte Gebiete Γ – speziell $\Gamma = R^n$ – erhalten wir

Satz 2

P_{st} sei eine positive, stationäre Lösung der Fokker-Planck-Gleichung im R^n mit der Eigenschaft $P_{st}(x) \to 0$, wenn $|x| \to \infty$. Ist $P(x, t)$ eine Lösung des Cauchy-Problems der Fokker-Planck-Gleichung mit den Anfangswerten $P(x, 0) = P_0(x) \geqq 0$ für $x \in R^n$, so daß $P/P_{st} \to$ const für $x \to \infty$, so gilt

$$\frac{\partial}{\partial t} H^f(P, P_{st}) \leqq 0 \quad \text{für alle konvexen Funktionen } f.$$

Die folgenden Bemerkungen sollen zur Illustration und Erklärung der angegebenen Sätze dienen.

Bemerkungen:

1. Obwohl das Funktional $H^f(P, Q)$ in P, Q nicht symmetrisch ist, sieht man sofort, daß $\frac{\partial}{\partial t} H^f(P, Q) \leqq 0$ genau dann, wenn $\frac{\partial}{\partial t} H^f(Q, P) \leqq 0$.
2. Auch wenn es nach Gleichung (6) ausreichen würde, daß $(\alpha_{ij}(x))$ nur positiv semidefinit ist, setzen wir doch die positive Definitheit voraus. Der Grund besteht darin, daß man zum Beweis grundlegender Sätze der Theorie parabolischer Differentialgleichungen mitunter sogar die schärfere Voraussetzung $\lambda \xi^2 \leqq \alpha_{ij} \xi_i \xi_j \leqq \lambda' \xi^2$, $\lambda, \lambda' > 0$, $\xi^2 = \xi_i \xi_j$ benötigt. Der Fall, daß (α_{ij}) nicht positiv semidefinit ist, führt zu folgenden Problemen (falls Lösungen existieren):
   a) Aus $P(x, 0) \geqq 0$ folgt nicht mehr $P(x, t) \geqq 0$, $t > 0$, so daß die Wahrscheinlichkeitsinterpretation mit der Zeit nicht mehr aufrechterhalten werden kann.
   b) Das Cauchy-Problem ist für solche Differentialgleichungen nicht mehr korrekt gestellt. Physikalisch bedeutet das ein extrem unstabiles Verhalten der Lösungen.
3. Die in Satz 1 verwendeten Voraussetzungen für die Verhältnisse auf dem Rand, d. h. die Adiabatenbedingung und die Bedingung $\alpha_i u_i = \frac{1}{2} \partial_j \alpha_{ij} u_i$, beschreiben die Abgeschlossenheit des Systems.
4. Die H-Theoreme gelten auch in den speziellen Fällen, wenn auf dem Rand $\partial\Gamma$ $P = Q$ und $\frac{\partial}{\partial t} \int_\Gamma P \,\mathrm{d}x = \frac{\partial}{\partial t} \int_\Gamma Q \,\mathrm{d}x = 0$. Das ist aber nur bei sehr speziellen Anfangsbedingungen erfüllt.

3. Beweis der H-Theoreme

Als relative Verteilung $A(x, t)$ definieren wir $A = \frac{P}{Q}$, wenn $Q \neq 0$. Des weiteren führen wir $\tilde{Q}_i = -\alpha_i Q + \frac{1}{2} \partial_j(\alpha_{ij} Q)$ (entsprechend $\tilde{P}_i$) ein. Mit dieser Bezeichnung schreibt sich die Fokker-Planck-Gleichung (3)

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \partial_i \tilde{Q}_i \quad \text{(entsprechend für } P). \tag{4}$$

Beweis von Satz 1: Für $\dfrac{\partial H^f}{\partial t}$ erhalten wir unter Verwendung von (4)

$$\frac{\partial H^f}{\partial t} = \int_\Gamma \frac{\partial Q}{\partial t} f(A)\,\mathrm{d}x + \int_\Gamma Q f'(A) \frac{\partial A}{\partial t}\,\mathrm{d}x, \qquad f'(x_0) = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x_0)$$

$$= \int_\Gamma f(A)\,\partial_i \tilde{Q}_i\,\mathrm{d}x + \int_\Gamma f'(A)\,\{\partial_i \tilde{P}_i - A\partial_i \tilde{Q}_i\}\,\mathrm{d}x.$$

Da $\partial_i \tilde{P}_i = A\,\partial_i \tilde{Q}_i + \tilde{Q}_i\,\partial_i A + \frac{1}{2}\partial_i(\alpha_{ij} Q\,\partial_j A)$, so erhält man (partielle Integration!):

$$\frac{\partial H^f}{\partial t} = \int_\Gamma f(A)\,\partial_i \tilde{Q}_i\,\mathrm{d}x + \int_\Gamma f'(A)\,\{\tilde{Q}_i \partial_i A + \frac{1}{2}\partial_i(\alpha_{ij} Q \partial_j A)\}\,\mathrm{d}x$$

$$= \int_{\partial\Gamma} f(A)\,\tilde{Q}_i\,\mathrm{d}S_i + \frac{1}{2}\int_\Gamma f'(A)\,\partial_i(\alpha_{ij} Q \partial_j A)\,\mathrm{d}x$$

$$= \int_{\partial\Gamma} f(A)\,\tilde{Q}_i\,\mathrm{d}S_i + \frac{1}{2}\int_{\partial\Gamma} f'(A)\,\alpha_{ij} Q \partial_j A\,\mathrm{d}S_i - \frac{1}{2}\int_\Gamma f''(A)\,\alpha_{ij} Q \partial_i A \partial_j A\,\mathrm{d}x. \tag{5}$$

Wir setzen $I_1 = \int_{\partial\Gamma} f(A)\,Q_i\,\mathrm{d}S_i$ und $I_2 = \frac{1}{2}\int_{\partial\Gamma} f'(A)\,\alpha_{ij} Q\,\partial_j A\,\mathrm{d}S_i$. Wegen der Adiabatenbedingung $\alpha_{ij}\,\partial_j Q u_i = 0$ bzw. $\alpha_{ij}\,\partial_j P u_i = 0$ und $\alpha_i u_i = \frac{1}{2}\partial_j \alpha_{ij} u_i$ auf dem Rand $\partial\Gamma$ folgt für I_1 und I_2:

$$I_1 = \int_{\partial\Gamma} f(A)\,\{Q(-\alpha_i + \tfrac{1}{2}\partial_j \alpha_{ij}) + \tfrac{1}{2}\alpha_{ij}\partial_j Q\}\,\mathrm{d}S_i = 0$$

$$I_2 = \tfrac{1}{2}\int_{\partial\Gamma} f'(A)\,\alpha_{ij}\,\{\partial_j P - A\partial_j Q\}\,\mathrm{d}S_i = 0.$$

Demzufolge erhält man

$$\frac{\partial H^f}{\partial t}(P, Q) = -\frac{1}{2}\int_\Gamma f''(A)\,Q \alpha_{ij} \partial_i A \partial_j A\,\mathrm{d}x \leqq 0,$$

denn $Q > 0$, α_{ij} positiv definit und für jede konvexe Funktion f ist $f'' \geqq 0$. /=/

Beweis von Satz 2: Wir betrachten eine Folge beschränkter Gebiete Γ_k mit $\Gamma_k \subset \Gamma_{k+1}$ und $\bigcup_k \Gamma_k = R^n$, für die wir Randbedingungen stellen, so daß die Voraussetzungen erfüllt sind. Für solch ein Gebiet Γ_k gilt Gleichung (5). Wir haben zu zeigen, daß im Limes $k \to \infty$ die Integrale I_1 und I_2 verschwinden. Man erhält

$$I_1 \to f(\mathrm{const}) \int_\infty P_{\mathrm{st},\,i}\,\mathrm{d}S_i = f(\mathrm{const}) \int_{R^n} \frac{\partial P_{\mathrm{st}}}{\partial t}\,\mathrm{d}x = 0 \quad \text{und} \quad I_2 = 0,$$

weil $P_{\mathrm{st}} \to 0$ für $|x| \to \infty$. /=/

Beweis zur Bemerkung 4: Wir gehen von der Gleichung (5) aus und führen wieder die Integrale I_1 und I_2 ein. Auf dem Rand gilt wegen der Randbedingung $P(x, t) = Q(x, t)$ für $x \in \partial\Gamma$ und $t \geqq 0: f(A) = f(1)$ und $f'(A) = f'(1)$.

$$I_1 = f(1) \int_{\partial\Gamma} \tilde{Q}_i\,\mathrm{d}S_i = f(1) \int_\Gamma \partial_i \tilde{Q}_i\,\mathrm{d}x = f(1) \int_\Gamma \frac{\partial Q}{\partial t}\,\mathrm{d}x,$$

$$I_2 = \frac{f'(1)}{2}\int_{\partial\Gamma} \alpha_{ij} Q\,\partial_j A\,\mathrm{d}S_i = \frac{f'(1)}{2}\int_{\partial\Gamma} \alpha_{ij}\{\partial_j P - A\partial_j Q\}\,\mathrm{d}S_i$$

$$= \frac{f'(1)}{2}\int_{\partial\Gamma} \alpha_{ij}\partial_j(P-Q)\,\mathrm{d}S_i \qquad (A = 1 \text{ auf } \partial\Gamma)$$

$$= \frac{f'(1)}{2}\int_{\Gamma} \partial_i\{\alpha_{ij}\partial_j(P-Q)\}\,\mathrm{d}x$$

$$= f'(1)\int_{\Gamma}\left\{\frac{\partial}{\partial t}(P-Q) + \partial_i(\alpha_i(P-Q))\right\}\mathrm{d}x \quad \text{(Verwendung von (4))}$$

$$= f'(1)\int_{\Gamma}\frac{\partial}{\partial t}(P-Q)\,\mathrm{d}x + f'(1)\int_{\partial\Gamma}\alpha_i(P-Q)\,\mathrm{d}S_i$$

$$= f'(1)\int_{\Gamma}\frac{\partial}{\partial t}(P-Q)\,\mathrm{d}x \qquad (P = Q \text{ auf } \partial\Gamma).$$

Einsetzen der endgültigen Form der Integrale I_1 und I_2 in (5) ergibt

$$\frac{\partial H^f}{\partial t}(P,Q) = -\frac{1}{2}\int_{\Gamma} f''(A)\,Q\alpha_{ij}\partial_i A\partial_j A\,\mathrm{d}x + f(1)\int_{\Gamma}\frac{\partial Q}{\partial t}\,\mathrm{d}x + f'(1)\int_{\Gamma}\frac{\partial}{\partial t}(P-Q)\,\mathrm{d}x.$$

Die H-Theoreme gelten also für alle konvexen Funktionen, wenn

$$\int_{\Gamma}\frac{\partial P}{\partial t}\,\mathrm{d}x = \int_{\Gamma}\frac{\partial Q}{\partial t}\,\mathrm{d}x = 0.$$

Diese Bedingungen sind aber auch notwendig. Davon überzeugt man sich, indem man die speziellen konvexen Funktionen $f(x) = x, -x, -x+1, x-1$ einsetzt. /=/

4. *Das Verhalten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen*

Sei $P(x,t)\,\mathrm{d}x$ für jedes $t \geqq 0$ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf Γ und sei $P_{st}(x)\,\mathrm{d}x$ eine nicht notwendigerweise normierte Verteilung mit $P_{st} \geqq 0$.
Wann ist dann für alle konvexen f

$$t \to H^f(P, P_{st}) \tag{7}$$

monoton fallend? Nach [7] ergibt sich die Antwort wie folgt:

Satz 3

Genau dann ist (7) für alle konvexen f monoton fallend, wenn für jedes $s \geqq 0$ die Funktion

$$e_s(t) = \sup_N \int_N P(x,t)\,dx \quad \text{mit} \quad \int_N P_{st}(x)\,\mathrm{d}x \leqq s$$

für wachsende t monoton fällt.

Bei der Bildung des Supremums für gegebenes s hat also N alle meßbaren Mengen zu durchlaufen, deren Maß bezüglich $P_{st}\,dx$ höchstens gleich s ist.

Für den Hinweis, daß die „H-Theoreme" der Markoffschen master equation eine Entsprechung für die Fokker-Planck-Gleichung haben sollten, sind wir Herrn *Ebeling*, Rostock, zu Dank verpflichtet. Der Fall der Fokker-Planck-Näherung der Boltzmann-Gleichung wurde für $f = x \ln x$ in [4] behandelt. Die Gültigkeit von Satz 2 ist viel früher schon von *van Kampen* [3] bemerkt worden.

Literatur

[1] *Friedmann, A.:* Partial differential equations of parabolic type. Englewood Cliffs, N. J.: Prentice Hall, Inc. 1964.
[2] *Kampen, N. G. van:* Stochastic processes in physics. Utrecht 1970.
[3] –*:* pers. Mitt., unveröff.
[4] *Libov, R. L.:* Introduction to the theory of kinetic equations. New York: Wiley 1969.
[5] Зубарев, Д.Н.: Неравновесная статистическая термодинамика. Москва 1971.
[6] *Uhlmann, A.:* Sitzungsber. AdW DDR 14N (1976).
[7] –*:* Wiss. Z. Karl-Marx-Univ. Leipzig, Math.-Naturwiss. R., *27* (1978) 213.

Zusammenfassung

Für die master equation gilt eine ganze Familie von H-Theoremen, die sog. H-Theoreme von Felderhof-van Kampen. Wir zeigen, daß ähnliche H-Theoreme auch für die Fokker-Planck-Gleichung gültig sind, und diskutieren das zeitliche Verhalten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen.

Schlüsselwörter: statistische Physik – H-Theoreme – Entropie – Fokker-Planck-Gleichung

Ключевые слова: Статистическая физика – Н-теорема – энтропия – уравнение Фоккера-Планка

Key terms: Statistical physics – H-theorems – entropy – Fokker-Planck equation

Mots-clés: Physique statistique – théorèmes H – entropie – équation de Fokker-Planck

Verfasser: Prof. Dr. sc. nat. *A. Uhlmann*,
Dr. rer. nat. *B. Crell*,
Dipl.-Phys. *T. de Paly*,
Karl-Marx-Universität, Sektion Physik,
DDR-701 Leipzig, Karl-Marx-Platz 10