Annalen der Physik. 7. Folge, Band 38, Heft 4/5, 1981, S. 329—333 J. A. Barth, Leipzig

Die Charakterisierung der Lösungen von Mastergleichungen, ein „inverses" Problem

Von Peter M. Alberti und Armin Uhlmann

Sektion Physik der Karl-Marx-Universität Leipzig

Herrn Prof. Dr. A. Lösche zum 60. Geburtstag gewidmet

Inhaltsübersicht. In einem endlich-dimensionalen Parameterraum sei eine Kurve gegeben. Wir beantworten die Frage, wie diese Kurve beschaffen sein muß, um Lösung einer Mastergleichung zu sein.

Characterization of the Solutions of Master Equations — an Inverse Problem

Abstract. Given a trajectory in a finite-dimensional parameter space. We answer the question wether there is a master equation having the given trajectory as one of its solutions.

1. Die Problemstellung

Mastergleichungen wurden durch Pauli [1] in die Physik eingeführt. Sehr wichtige Studien stammen in dem uns hier allein interessierenden endlich-diskreten Fall von Frechet [2], Doeblin [3] und Doob [4], die diese Gleichungen in ihrem Zusammenhang mit Markovschen Ketten betrachten. Ihren Platz in der Statistischen Physik bestimmt die Tatsache, daß die Mastergleichungen die Klasse der linearen und gedächtnislosen Evolutionsgleichungen mit Dissipation ausschöpfen. Insbesondere sind die Fokker-Planck-Gleichungen einerseits als Approximationen von (kontinuierlichen) Mastergleichungen auffaßbar und andererseits selbst approximierbar durch Mastergleichungen, die dadurch entstehen, daß man die partiellen Differentialquotienten geeignet durch Differenzenquotienten annähert. Sei

$$t \to x(t) = \{x^1(t), \ldots, x^n(t)\}, \quad t > 0 \tag{1}$$

eine Kurve in einem n-dimensionalen Vektorraum. Nehmen wir nun an, daß (1) Lösung eines Differentialgleichungssystems

$$\sum_i L_i^k \, x^i(t) = (d/dt) \, x^k(t) \tag{2}$$

ist welches für alle i und alle $i \neq j$

$$\sum_k L_i^k = 0 \quad \text{und} \quad L_i^j \geq 0, \; i \neq j, \tag{3}$$

erfüllt. Das Differentialgleichungssystem (2), $Lx = \dot{x}$, heißt Mastergleichung genau dann, wenn (3) gilt.

Was folgt nun aus der Annahme, daß (1) Lösung einer solchen Mastergleichung ist? Wichtige Folgerungen aus einer solchen Annahme sind:

1.1. Gilt zu einem Zeitpunkt t_0: $x^i(t_0) \geq 0$ für alle i, so haben wir auch für alle $t \geq t_0$: $x^i(t) \geq 0$.

1.2. Die Summe $x^1(t) + \ldots + x^n(t)$ ist von t unabhängig.

Hieraus ersieht man: Ist $\boldsymbol{x}(t_0)$ ein Wahrscheinlichkeitsvektor, so auch $\boldsymbol{x}(t)$ für alle Zeiten $t \geq t_0$. Berührt also eine Kurve (1) irgendwann die Menge der Wahrscheinlichkeitsvektoren, welche oft als Menge der „Zustände" eines Systems interpretierbar ist, so verbleibt die Kurve von diesem Zeitpunkt an ständig in dieser Menge. Weiß man andererseits, daß die Lösungen einer Differentialgleichung (2) diese Eigenschaft haben, so folgt (3), d.h. die die Mastergleichungen definierenden Bedingungen.

1.3. Aus (3) ersieht man, daß die Matrizen

$$T(t) = \exp tL, \quad t \geq 0 \tag{4}$$

alle stochastisch sind. Für ihre Matrixelemente gilt dann also

$$T_i^k \geq 0 \quad \text{und} \quad \sum_j T_i^j = 1. \tag{5}$$

(Wir nennen hier also eine Matrix s t o c h a s t i s c h, wenn alle ihre Spaltenvektoren Wahrscheinlichkeitsvektoren sind.)

Etwas tiefer und an die Endlichkeit von n in (1) wesentlich gebunden ist der folgende Sachverhalt.:

1.4. Ist (1) eine Lösung einer Mastergleichung, so konvergiert $\boldsymbol{x}(t)$ für $t \to \infty$ gegen eine stationäre Lösung $\boldsymbol{x}(\infty)$ der Mastergleichung.

$$\lim_{t\to\infty} \boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{x}(\infty), \quad L\boldsymbol{x}(\infty) = 0. \tag{6}$$

Es ist diese Eigenschaft, die die Mastergleichungen auch bei nichtlinearen Problemen attraktiv macht. Ist $\boldsymbol{x}(\infty)$ ein bedingt stabiler Zustand fern vom Gleichgewicht eines nicht-linearen thermodynamischen Systems, so kann unter Umständen die Annäherung des Systems an diesen Zustand asymptotisch durch eine Mastergleichung beschrieben werden.

Eine ganz analoge Anwendung erschließt 1.4. möglicherweise auch für die Kontrolle großer technischer Systeme, die durch n Parameter kontrolliert werden: Weiß man, daß die Kurve (1) der Kontrollparameter einer Mastergleichung genügt, deren genauere Struktur ganz irrelevant in diesem Zusammenhang ist, so ist man einer „ruhigen" Annäherung an ein stabiles Regime sicher!

Hieraus kann man ersehen, daß es von einigem physikalischen und eventuell auch technischem Interesse ist, zu erkennen, ob eine (z.B. empirisch) gegebene Kurve irgendeiner Mastergleichung genügt. Zur Lösung dieses Problems stellen wir im nächsten Abschnitt die erforderlichen Mittel bereit. Auf die mathematischen Beweise müssen wir allerdings wegen ihres Umfangs verzichten und können nur auf die Literatur verweisen.

2. Die „*H*-Theoreme" für Mastergleichungen

Bereits PAULI war Folgendes bekannt: Ist $\boldsymbol{x}(t)$ eine beliebige und $\boldsymbol{y}$ eine stationäre, d.h. zeitunabhängige Lösung einer Mastergleichung, und sind alle Vektoren $\boldsymbol{x}(t)$, $\boldsymbol{y}$, Wahrscheinlichkeitsvektoren, so fällt die Größe

$$t \to \sum_k x^k(t) \, [\ln x^k(t) - \ln y^k] \tag{7}$$

bei wachsendem t monoton ab. VAN KAMPEN [5] zeigte, daß unter der gleichen Voraussetzung sogar

$$\sum_k x^k(t) \, g(x^k(t)/y^k) \tag{8}$$

monoton fällt, wenn nur für die zweite Ableitung g'' von g

$$g'' \geq 0 \tag{9}$$

erfüllt ist. Für das Verständnis des Folgenden sei noch vermerkt: (9) ist gleichbedeutend mit der in u, v simultanen Konvexität von $u, v \to f(u, v) = u\, g(u/v)$. Das eben definierte f ist außerdem noch homogen, d.h. $f(\beta u, \beta v) = \beta f(u, v)$ für positive β. Da (8) für die Lösungen von Mastergleichungen fällt, spricht man von ihnen auch als von „generalisierten H-Theoremen". Allerdings ist die Boltzmanngleichung keine Mastergleichung. Daher ist die Monotonie von (7) nicht mit dem Boltzmannschen H-Theorem zu identifizieren.

Welche Bedeutung hat nun das Fallen aller Größen (8) im Verlaufe der Zeit unter der Voraussetzung von (9)? In Erweiterung eines Satzes von RADO konnten RUCH, SCHRANNER und SELIGMAN [6] zeigen, daß für vier Wahrscheinlichkeitsvektoren $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}, \boldsymbol{d}$, genau dann simultan

$$\boldsymbol{b} = T\boldsymbol{a} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{d} = T\boldsymbol{c}$$

mit stochastischem T gilt, wenn für alle g mit $g'' \geq 0$

$$\sum_k c^k\, g(a^k/c^k) \geq \sum_k d^k g(b^k/d^k)$$

erfüllt ist. Dieses System von Ungleichungen ist ein „klassisches" Analogon zu einem ähnlichen für Dichtematrizen [7].

Wir benötigen jedoch ein etwas stärkeres Resultat. Um es zu formulieren, benötigen wir eine weitere Definition. Sei m eine ganze positive Zahl und $f(s_1, \ldots, s_m)$ eine reellwertige Funktion. f heißt h-konvex, wenn für positives s gilt

$$f(ss_1, \ldots, ss_m) = s\, f(s_1, \ldots, s_m)$$

und wenn ferner für beliebige reelle Zahlen s_{jk}

$$f\Big(\sum_i s_{1i}, \ldots, \sum_i s_{mi}\Big) \leq \sum_i f(s_{1i}, \ldots, s_{mi}) \tag{10}$$

ist. Ist $m = 2$ und $g'' \geq 0$, so ist, wie schon bemerkt, $f(s_1, s_2) = s_2\, g(s_1/s_2)$ h-konvex. Eine direkte Verallgemeinerung der Größen (7) und (8) wird daher durch die Ausdrücke

$$S_f^{(m)}(\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_m) = \sum_k f(a_1^k, \ldots, a_m^k) \tag{11}$$

gegeben. Hier bezeichnet a_j^k die k-te Komponente des Vektors $\boldsymbol{a}_j$. Es ist daher vielleicht nicht zu überraschend, daß wir den „generalisierten H-Theoremen" noch weitere hinzufügen können.

2.1. Satz: Sei $f(s_1, \ldots, s_m)$ h-konvex. Ist T eine stochastische Matrix, so gilt für beliebige Vektoren $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_m$

$$S_f^{(m)}(T\boldsymbol{a}_1, \ldots, T\boldsymbol{a}_m) \leq S_f^{(m)}(\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_m) \tag{12}$$

2.2. Satz: Sind $\boldsymbol{x}_1(t), \ldots, \boldsymbol{x}_m(t)$ Lösungen einer Mastergleichung, so fallen für alle h-konvexen f die Größen

$$t \to S_f^{(m)}(\boldsymbol{x}_1(t)), \ldots, \boldsymbol{x}_m(t)) \tag{13}$$

monoton bei wachsendem t.

Es entsteht die Frage, ob sich diese Sachverhalte umkehren lassen. Bei der Untersuchung dieser Frage hat sich herausgestellt, daß man keineswegs alle Ungleichungen (12) nachprüfen muß. Es langt eine Auswahl von h-konvexen Funktionen hierzu heranzuziehen. Diese werden wie folgt konstruiert: Für beliebige reelle Zahlen r_{kj} mit k, j zwischen 1 und m wird die Funktion

$$f(s_1,\ldots,s_m) = \sup_k \sum_j r_{kj}s_j \tag{14}$$

gebildet. (14) ist eine h-konvexe Funktion.

2.3. Satz: Seien $\boldsymbol{a}_1,\ldots,\boldsymbol{a}_m$ und $\boldsymbol{b}_1,\ldots,\boldsymbol{b}_m$ Vektoren. Ist für jedes f der Form (14) die Ungleichung

$$S_f^{(m)}(\boldsymbol{b}_1,\ldots,\boldsymbol{b}_m) \leq S_f^{(m)}(\boldsymbol{a}_1,\ldots,\boldsymbol{a}_m) \tag{15}$$

erfüllt, so gibt es eine stochastische Matrix T so, daß

$$\boldsymbol{b}_j = T\boldsymbol{a}_j,\ j = 1,2,\ldots,m. \tag{16}$$

Für die Beweise von 2.1 bis 2.3 verweisen wir auf die Literatur [8]. Dort findet sich auch der Fall $n = \infty$ und andere.

3. Das „inverse" Problem

Wir haben bisher eine offensichtliche Tatsache noch nicht benutzt: Ist (1) eine Lösung von (2) und ist t_0 beliebig, so ist auch $t \to \boldsymbol{x}(t - t_0)$ eine Lösung unserer Differentialgleichung. Wenn wir dies auf 2.2 anwenden, erhalten wir

3.1. Sei $t \to \boldsymbol{x}(t)$, $t > 0$, Lösung einer Mastergleichung. Sind dann $s_1,\ldots,s_m$ nichtnegativ und f h-konvex, so fällt

$$t \to S_f^{(m)}\,(\boldsymbol{x}(t+s_1),\ldots,\boldsymbol{x}(t+s_m)) \tag{17}$$

monoton bei wachsendem t.

Für die umgekehrte Fragestellung betrachten wir zunächst das hier viel einfachere Problem der Markovschen Ketten:

3.2. Sei $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2,\ldots$ eine Folge von Vektoren. Angenommen für jedes m und alle h-konvexen Funktionen der Form (14) gelte

$$S_f^{(m)}(\boldsymbol{a}_1,\ldots,\boldsymbol{a}_m) \geq S_f^{(m)}(\boldsymbol{a}_2,\ldots,\boldsymbol{a}_{m+1}) \tag{18}$$

Dann gibt es eine stochastische Matrix T mit der für alle natürlichen Zahlen j, k gilt:

$$T^j\boldsymbol{a}_k = \boldsymbol{a}_{j+k} \tag{19}$$

Der Beweis ist einfach. Wegen (18) gibt es nach 2.1 ein stochastisches T_m mit $T_m\boldsymbol{a}_j = \boldsymbol{a}_{j+1}$ für $j = 1,2,\ldots,m$. Die Menge der stochastischen Matrizen ist kompakt. Also hat die Folge $T_1, T_2,\ldots$ mindestens einen Häufungspunkt. Ist T ein solcher Häufungspunkt, so gilt offensichtlich $T\,\boldsymbol{a}_j = \boldsymbol{a}_{j+1}$ für jedes j.

Die angekündigte Lösung des „inversen" Problems ist nun in dem folgenden Satz enthalten.

3.3. Satz: Sei $t \to \boldsymbol{x}(t)$, $t > 0$, eine Kurve in einem n-dimensionalen Vektorraum. Genau dann ist diese Kurve Lösung einer Mastergleichung, wenn für jedes m, jede Wahl von positiven Zeitpunkten $t_1,\ldots,t_m$ und für jede h-konvexe Funktion der Gestalt (14) das Funktional

$$t \to S_f^{(m)}\,(\boldsymbol{x}(t+t_1),\ldots,\boldsymbol{x}(t+t_m)) \tag{20}$$

monoton fällt.

Für den recht komplizierten Beweis verweisen wir auf [9] und [10] und beschränken uns hier auf einige Bemerkungen:

Wie überall in dieser Arbeit schließt die Forderung nach monotonem Fallen die Möglichkeit des Konstantbleibens mit ein.

Ist n' die Dimension des von allen Vektoren $\boldsymbol{x}(t)$ aufgespannten Vektorraumes, so genügt die Nachprüfung des Fallens von (20) für $m = 2\,n'$. Höhere m brauchen nicht berücksichtigt zu werden. Weiterhin bemerken wir, daß die Aussage von Satz 3.3 äquivalent ist mit der Existenz einer stetigen Halbgruppe $t \rightarrow T(t)$ von stochastischen Abbildungen, die neben $T(0) = 1$, $T(s + t) = T(s)\, T(t)$, die Kurve erzeugt:

$$T(t)\, x(s) = x(t + s).$$

Eine der Hauptschwierigkeiten beim Beweis besteht darin, aus dem monotonen Verhalten von (20) die Stetigkeit einer solchen Halbgruppe und damit auch der Kurve selbst zu zeigen. Tatsächlich folgt aus Satz 3.3 ja sogar, daß eine Kurve, die die Bedingungen des Satzes erfüllt, reell analytisch ist. Dies aber ist für die Beurteilung empirischer Kurven ohne Zweifel wichtig: Eine genügend „dichte“ Wahl der Kontrollpunkte läßt bei monotonem Verhalten von (20) einen entsprechend „weichen“ Verlauf erwarten.

Literaturverzeichnis

[1] W. Pauli, Festschrift zum 60. Geburtstag A. Sommerfelds, Leipzig: Hirzel-Verlag 1928.
[2] M. Fréchet, Traité du Calcul des Probabilités et de ses Applications, Vol. I, Paris: Gauthier-Villars 1938.
[3] W. Doeblin, Bull. des Sc. Math. **62**, 21 (1938).
[4] J. L. Doob, Trans. Am. Math. Soc. **52**, 37 (1942).
[5] N. G. van Kampen, Fundamental Problems in Statistical Mechanics, (ed.: E. G. D. Cohen), Amsterdam: North-Holland Publ. Comp. 1962.
[6] E. Ruch, R. Schranner u. Th. Seligman, J. Chem. Phys. **69**, 386 (1978).
[7] A. Uhlmann, Wiss. Z. Karl-Marx-Univ. Leipz. **20**, 633 (1971).
[8] P. M. Alberti u. A. Uhlmann, Math. Nachr. **97**, 279 (1980).
P. M. Alberti u. A. Uhlmann, Stochasticity and Partial Order, Berlin: Dt. Verlag der Wissenschaften, im Druck.
[9] P. M. Alberti u. A. Uhlmann, eingereicht in J. Math. Phys.
[10] P. M. Alberti u. A. Uhlmann, Dissipative Motion in State Spaces, Teubner Texte z. Math., Bd. 33, Leipzig: Teubner Verlagsg. 1981.

Bei der Redaktion eingegangen am 5. November 1980.

Anschr. d. Verf.: Dr. P. Alberti, Prof. Dr. A. Uhlmann
Sektion Physik der Karl-Marx-Universität
DDR-7010 Leipzig
Karl-Marx-Platz