

# 非平衡系统 Master 方程的稳定性

李 占 柄

(北京师范大学数学系)

严 士 健

(北京师范大学数学系、北京师范大学量子力学小组)

刘 若 庄

(北京师范大学化学系、北京师范大学量子力学小组)

1980年5月24日收到

## 提 要

针对非平衡统计中出现的多元线性 Master 方程,利用“熵产生”和“剩余熵产生”的概念讨论了 Master 方程在线性平衡区和非线性远离平衡区的 Ляпунов 稳定性问题。从而得到与 Prigo-gine 宏观热力学理论中一致的结果。此外还提出了 Master 方程所决定的“概率流”的概念,给出了概率流分解的具体解析表达式。

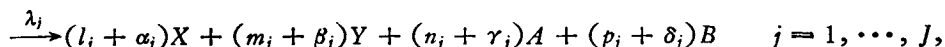
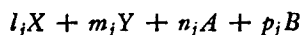
## 一、引 言

自从比利时学派 Prigo-gine 等人提出远离平衡区的耗散结构理论以来,无论是对宏观的反应扩散方程,微观的 Master 方程的研究,还是在其他学科领域里的应用都取得了不少进展<sup>[3-7]</sup>。

本文针对文献[1]中提出的概率假定所建立的多元线性 Master 方程,利用“熵产生”和“剩余熵产生”的概念讨论了 Master 方程的 Ляпунов 稳定性问题,得到与 Prigo-gine 宏观热力学理论中一致的结果。

## 二、Master 方程的稳定性

现在考虑多元线性 Master 方程的概率模型,设有一开放系统位于空间区域  $V$  内。为了书写简便,设所要讨论的物种只有两个,用  $X, Y$  表示,其余参加反应的也只有两个物种  $A, B$ , 它们在  $V$  中所进行的基本反应共有下列  $J$  个:



并且有扩散运动。设将  $V$  分割成  $N$  个两两不交的体积相同的正方形  $V_1, \dots, V_N$ 。物种

$X, Y$  在时刻  $t$  位于  $V_i$  中的粒子数分别记作  $X_i(t), Y_i(t)$ ; 并记  $\mathbf{X}(t) = (X_1(t), \dots, X_N(t))$ ,  $\mathbf{Y}(t) = (Y_1(t), \dots, Y_N(t))$ . 设物种  $A, B$  在  $V_i$  中的粒子数不变, 并分别记作  $a_i, b_i$ .

系统在一些假设下, 概率  $P(\mathbf{X}(t) = x, \mathbf{Y}(t) = y) = P(x, y, t)$  满足下列方程:

$$\begin{aligned} \frac{dP(x, y, t)}{dt} = & \sum_{i, j=1}^N \left\{ [d_{ij}^x(x_i + 1)P(x + e_i - e_j, y, t) \right. \\ & - d_{ij}^x x_i P(x, y, t)] + [d_{ij}^y(y_i + 1)P(x, y + e_i - e_j, t) \\ & \left. - d_{ij}^y y_i P(x, y, t)] \right\} + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^J \lambda_i \binom{a_i}{n_j} \binom{b_i}{p_j} \\ & \cdot \left[ \binom{x_i - \alpha_j}{l_j} \binom{y_i - \beta_j}{m_j} P(x - \alpha_j \cdot e_i, y - \beta_j \cdot e_i, t) - \binom{x_i}{l_j} \binom{y_i}{m_j} P(x, y, t) \right]. \end{aligned}$$

合并同类项, 得到多元线性 Master 方程的一般数学形式

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_j (P_j q_{ji} - P_i q_{ij}). \quad (2.1)$$

这里  $i, j$  表示系统所处的状态, 它们是有限的,  $q_{ij}$  是依赖于  $d_{ij}^x, d_{ij}^y, \lambda_j, a_i, b_i$  等参数. 这些参数的变化将影响着 Master 方程的稳定性, 此外, 不失一般性总可以假定  $\forall i, P_i > 0$ .

这样, 对系统可以定义“熵”, “熵产生”, “熵流”等概念.

定义:  $\{P_i\}$  是 Master 方程(2.1)的解,  $S(t) \triangleq - \sum_i P_i \ln P_i$  称为 Master 方程(2.1)的“熵”.

$$\frac{dS}{dt} = - \left( \sum_i \frac{dP_i}{dt} \ln P_i + \sum_i P_i \frac{d \ln P_i}{dt} \right),$$

因  $\sum_i P_i = 1$ , 故  $\sum_i \frac{dP_i}{dt} = 0$ .

$$\frac{dS}{dt} = - \sum_i \frac{dP_i}{dt} \ln P_i.$$

根据(2.1)式, 有

$$\frac{dS}{dt} = - \sum_{i,j} (P_j q_{ji} - P_i q_{ij}) \ln P_i.$$

交换上式中  $i$  与  $j$  的指标, 与原式相加除以 2, 得到

$$\frac{dS}{dt} = - \frac{1}{2} \sum_{i,j} (P_j q_{ji} - P_i q_{ij}) \ln \frac{P_i}{P_j}.$$

根据 Master 方程的推导来源(参看文献[1]), 有  $\forall i, j, i \neq j, q_{ij} \geq 0$ .

故

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} = & - \left[ \frac{1}{2} \sum_{i,j} (P_j q_{ji} - P_i q_{ij}) \ln \frac{P_i q_{ij}}{P_j q_{ji}} \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \sum_{i,j} (P_j q_{ji} - P_i q_{ij}) \ln \frac{q_{ji}}{q_{ij}} \right]. \end{aligned}$$

注: 若  $q_{ij} = 0, q_{ji} \neq 0$ , 则  $\ln \frac{q_{ij}}{q_{ji}} \triangleq -\infty$ ;

若  $q_{ij} \neq 0, q_{ji} = 0$ , 则  $\ln \frac{q_{ij}}{q_{ji}} \triangleq +\infty$ ;

若  $q_{ij} = 0, q_{ji} = 0$ , 则  $\ln \frac{q_{ij}}{q_{ji}} \triangleq 0$ .

定义:  $\frac{d_i S}{dt} \triangleq -\frac{1}{2} \sum_{i,j} (P_i q_{ji} - P_j q_{ij}) \ln \frac{P_i q_{ji}}{P_j q_{ij}}$  称为 Master 方程 (2.1) 的“熵产生”.

定义:  $\frac{d_e S}{dt} \triangleq -\frac{1}{2} \sum_{i,j} (P_i q_{ji} - P_j q_{ij}) \ln \frac{q_{ji}}{q_{ij}}$  称为 Master 方程 (2.1) 的“熵流”.

所以

$$\frac{dS}{dt} = \frac{d_i S}{dt} + \frac{d_e S}{dt}.$$

注:  $\frac{dS}{dt}$  是有意义的,  $\frac{d_i S}{dt}$  也是有意义的, 可能为  $+\infty$ , 这时  $\frac{d_e S}{dt}$  应理解为  $\frac{dS}{dt} - \frac{d_i S}{dt}$ .

定义:  $\{P_i\}$  是 Master 方程 (2.1) 的解, 如果  $\forall i, j$  使得  $P_i q_{ji} - P_j q_{ij} = 0$ , 则称  $\{P_i\}$  为细致平衡态 (即平衡态), 记作  $\{P_i^0\}$ .

定义:  $\{P_i\}$  是 Master 方程 (2.1) 的解, 如果  $\forall i$  使得  $\sum_j (P_j q_{ji} - P_i q_{ij}) = 0$ , 则称  $\{P_i\}$  为定态, 记作  $\{P_i^*\}$ .

显然, 平衡态一定是定态.

**定理 1.**  $\frac{d_i S}{dt} \geq 0$ , 等式成立当且仅当是平衡态.

证: 充分性是显然的.

必要性

$$\frac{d_i S}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} (P_i q_{ji} - P_j q_{ij}) \ln \frac{P_i q_{ji}}{P_j q_{ij}},$$

$$\text{设 } f_{ij} = (P_i q_{ji} - P_j q_{ij}) \ln \frac{P_i q_{ji}}{P_j q_{ij}},$$

若  $q_{ij} = q_{ji} = 0$ , 则  $f_{ij} = 0$ ;

若  $q_{ij} = 0, q_{ji} \neq 0$ , 则  $f_{ij} = +\infty$ ;

若  $q_{ij} \neq 0, q_{ji} = 0$ , 则  $f_{ij} = +\infty$ ;

若  $q_{ij} \neq 0, q_{ji} \neq 0$ ,

若  $P_i q_{ji} - P_j q_{ij} \geq 0$ , 则  $\ln \frac{P_i q_{ji}}{P_j q_{ij}} \geq 0$ ;

若  $P_i q_{ji} - P_j q_{ij} \leq 0$ , 则  $\ln \frac{P_i q_{ji}}{P_j q_{ij}} \leq 0$ .

总之  $f_{ij} \geq 0$ .

若  $\frac{d_i S}{dt} = 0$ , 则  $P_i q_{ji} = P_j q_{ij}$ .

证毕.

定态时,“熵”为零. 平衡态时,“熵产生”为零. “熵产生”为零,“熵”一定为零. 反之,不一定.

定义:  $\mathcal{J}_{ij} \triangleq -(P_i q_{ji} - P_j q_{ij})$  称为“流”.

定义:  $A_{ij} \triangleq \ln(P_i q_{ij}/P_j q_{ji})$  称为“力”.

显然,若  $\{P_i^0\}$  为平衡态,则  $\mathcal{J}_{ij}^0 = 0$ ; 若  $\{P_i^s\}$  为定态,则  $\sum_i \mathcal{J}_{ij}^s = 0$ .

设

$$\begin{aligned} P &\triangleq \frac{d_i S}{dt} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} (P_i q_{ji} - P_j q_{ij}) \ln \frac{P_i q_{ij}}{P_j q_{ji}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{ij} \mathcal{J}_{ij}, \\ \frac{dP}{dt} &= \frac{1}{2} \left( \sum_{i,j} \frac{dA_{ij}}{dt} \mathcal{J}_{ij} + \sum_{i,j} A_{ij} \frac{d\mathcal{J}_{ij}}{dt} \right), \\ \frac{d_A P}{dt} &\triangleq \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{dA_{ij}}{dt} \mathcal{J}_{ij}. \end{aligned}$$

**定理 2.**  $\frac{d_A P}{dt} \leq 0$  等式成立当且仅当是定态.

证:

$$\begin{aligned} \frac{d_A P}{dt} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{dA_{ij}}{dt} \mathcal{J}_{ij}, \\ \frac{dA_{ij}}{dt} &= \frac{d}{dt} (\ln P_i q_{ij} - \ln P_j q_{ji}) = \frac{1}{P_i} \frac{dP_i}{dt} - \frac{1}{P_j} \frac{dP_j}{dt}, \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} \frac{d_A P}{dt} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left[ \left( \frac{1}{P_i} \frac{dP_i}{dt} - \frac{1}{P_j} \frac{dP_j}{dt} \right) \mathcal{J}_{ij} \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{1}{P_i} \frac{dP_i}{dt} \mathcal{J}_{ij} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{1}{P_j} \frac{dP_j}{dt} \mathcal{J}_{ij} \\ &= \frac{1}{2} \sum_i \frac{1}{P_i} \frac{dP_i}{dt} \left( \sum_j \mathcal{J}_{ij} \right) - \frac{1}{2} \sum_j \frac{1}{P_j} \frac{dP_j}{dt} \left( \sum_i \mathcal{J}_{ij} \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_i \frac{1}{P_i} \frac{dP_i}{dt} \left( -\frac{dP_i}{dt} \right) - \frac{1}{2} \sum_j \frac{1}{P_j} \frac{dP_j}{dt} \left( \frac{dP_j}{dt} \right) \\ &= -\sum_i \frac{1}{P_i} \left( \frac{dP_i}{dt} \right)^2 \leq 0. \end{aligned}$$

证毕.

近平衡区:  $\forall i \quad |P_i - P_i^0| \ll 1$ ;

$$\forall i, j \quad |A_{ij} - A_{ij}^0| \ll 1 \text{ (即 } |A_{ij}| \ll 1 \text{)}.$$

这时,有

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{ij} &= P_i q_{ji} - P_j q_{ij} \\ &= e^{\ln P_i q_{ij}} - e^{\ln P_j q_{ji}} \\ &= e^{\ln P_i q_{ij}} (1 - e^{-(\ln P_i q_{ij} - \ln P_j q_{ji})}) \\ &= e^{\ln P_i q_{ij}} (1 - e^{-A_{ij}}) \end{aligned}$$

$$= P_i q_{ij} \left[ 1 - \left( 1 + \sum_{K=1}^{\infty} \frac{(-1)^K}{K!} (A_{ij})^K \right) \right].$$

同理,

$$\mathcal{F}_{ij} = P_i q_{ji} \left[ \left( 1 + \sum_{K=1}^{\infty} \frac{1}{K!} (A_{ij})^K \right) - 1 \right].$$

$$\text{故 } \mathcal{F}_{ij} = \frac{P_i q_{ij} + P_j q_{ji}}{2} A_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{K=2}^{\infty} \frac{1}{K!} (A_{ij})^K [(-1)^{K-1} P_i q_{ij} + P_j q_{ji}],$$

又因  $A_{ij} = -A_{ji}$ ,

故

$$\mathcal{F}_{ij} = \left( \frac{P_i q_{ij} + P_j q_{ji}}{4} \right) A_{ij} + \left( -\frac{P_i q_{ij} + P_j q_{ji}}{4} \right) A_{ji} + o(A_{ij}).$$

因  $|P_i - P_i^0| \ll 1$ , 忽略  $o(|A_{ij}|)$ , 得到

$$\mathcal{F}_{ij} = \frac{P_i^0 q_{ij} + P_j^0 q_{ji}}{4} A_{ij} + \left( -\frac{P_i^0 q_{ij} + P_j^0 q_{ji}}{4} \right) A_{ji}.$$

从而可以看出, “流”和“力”之间的关系是线性关系.

设

$$a_{ij}^0 = \frac{P_i^0 q_{ij} + P_j^0 q_{ji}}{4}, \quad a_{ji}^0 = -\frac{P_i^0 q_{ij} + P_j^0 q_{ji}}{4},$$

则  $\mathcal{F}_{ij} = a_{ij}^0 A_{ij} + a_{ji}^0 A_{ji}$ .

从而  $\frac{\partial \mathcal{F}_{ij}}{\partial A_{ji}} = \frac{\partial \mathcal{F}_{ji}}{\partial A_{ij}} = a_{ji}^0$ .

下面讨论在线性近平衡区和非线性远离平衡区 Master 方程(2.1)的稳定性问题.

### 1) 线性近平衡区

$$\forall i \quad |P_i - P_i^0| \ll 1,$$

$$\forall i, j \quad |A_{ij} - A_{ij}^0| \ll 1 \text{ (即 } |A_{ij}^0| \ll 1 \text{)}.$$

有

$$\mathcal{F}_{ij} = a_{ij}^0 A_{ij} + a_{ji}^0 A_{ji},$$

$$\frac{d\mathcal{F}_{ij}}{dt} = a_{ij}^0 \frac{dA_{ij}}{dt} + a_{ji}^0 \frac{dA_{ji}}{dt},$$

所以

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{F}_{ij}}{dt} A_{ij} &= a_{ij}^0 \frac{dA_{ij}}{dt} A_{ij} + a_{ji}^0 \frac{dA_{ji}}{dt} A_{ij} \\ &= (a_{ij}^0 A_{ij} + a_{ji}^0 A_{ji}) \frac{dA_{ij}}{dt} \\ &= \mathcal{F}_{ij} \frac{dA_{ij}}{dt}. \end{aligned}$$

根据定理 1, 有  $P = \frac{d_i S}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{ij} \mathcal{F}_{ij} \geq 0$ ,

$$\begin{aligned}\frac{dP}{dt} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left( \frac{dA_{ij}}{dt} \mathcal{T}_{ij} + A_{ij} \frac{d\mathcal{T}_{ij}}{dt} \right) \\ &= \sum_{i,j} \frac{dA_{ij}}{dt} \mathcal{T}_{ij} = \frac{d_A P}{dt}.\end{aligned}$$

根据定理 2, 有  $\frac{d_A P}{dt} \leq 0$ , 所以  $\frac{dP}{dt} \leq 0$ .

若  $P$  作为 Ляпунов 函数, 则线性近平衡区 Master 方程是稳定的.

## 2) 非线性远离平衡区

定义:  $\delta_A P = \sum_{i,j} \mathcal{T}_{ij} \delta A_{ij}$  称为“剩余熵产生”.

$$\begin{aligned}S &= - \sum_i P_i \ln P_i, \\ \delta S &= \sum_i \frac{\partial S}{\partial P_i} \delta P_i \\ &= \sum_i [-(\ln P_i + 1)] \delta P_i, \\ \delta^2 S &= \delta(\delta S) = - \sum_{i,j} \frac{\partial(\ln P_i + 1)}{\partial P_j} \delta P_i \delta P_j \\ &= - \sum_i \frac{1}{P_i} \delta P_i \delta P_i \leq 0.\end{aligned}$$

在远离平衡区定态附近

$$\begin{aligned}\forall i \quad \delta P_i &= P_i - P_i^\infty, \\ \forall i, j \quad \delta \mathcal{T}_{ij} &= \mathcal{T}_{ij} - \mathcal{T}_{ij}^\infty, \quad \delta A_{ij} = A_{ij} - A_{ij}^\infty,\end{aligned}$$

这时有  $\delta^2 S = - \sum_i \frac{1}{P_i^\infty} \delta P_i \delta P_i$ .

因

$$\frac{d}{dt} (\delta P_i) = \delta \left( \frac{dP_i}{dt} \right),$$

所以

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} (\delta^2 S) &= - 2 \sum_i \frac{1}{P_i^\infty} \delta P_i \cdot \delta \left( \frac{dP_i}{dt} \right) \\ &= - \sum_i \frac{\delta P_i}{P_i^\infty} \delta \left( \sum_j \mathcal{T}_{ij} \right) - \sum_j \frac{\delta P_j}{P_j^\infty} \delta \left( \sum_i \mathcal{T}_{ij} \right) \\ &= \sum_i \frac{\delta P_i}{P_i^\infty} \delta \left( \sum_j \mathcal{T}_{ij} \right) - \sum_j \frac{\delta P_j}{P_j^\infty} \delta \left( \sum_i \mathcal{T}_{ij} \right) \\ &= \sum_{i,j} \left( \frac{\delta P_i}{P_i^\infty} - \frac{\delta P_j}{P_j^\infty} \right) \delta \mathcal{T}_{ij}.\end{aligned}$$

另一方面

$$\delta_A P = \sum_{i,j} \mathcal{T}_{ij} \delta A_{ij}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i,j} (\mathcal{T}_{ij}^{\infty} + \delta \mathcal{T}_{ij}) \delta A_{ij} \\
&= \sum_{i,j} \mathcal{T}_{ij}^{\infty} \delta A_{ij} + \sum_{i,j} \delta \mathcal{T}_{ij} \delta A_{ij} \\
&= \sum_{i,j} \mathcal{T}_{ij}^{\infty} \left[ \left( \frac{\partial A_{ij}}{\partial P_i} \right)_{\infty} \delta P_i + \left( \frac{\partial A_{ij}}{\partial P_j} \right)_{\infty} \delta P_j \right] \\
&\quad + \sum_{i,j} \delta \mathcal{T}_{ij} \left[ \left( \frac{\partial A_{ij}}{\partial P_i} \right)_{\infty} \delta P_i + \left( \frac{\partial A_{ij}}{\partial P_j} \right)_{\infty} \delta P_j \right] \\
&= \sum_{i,j} \mathcal{T}_{ij}^{\infty} \left( \frac{\delta P_i}{P_i^{\infty}} - \frac{\delta P_j}{P_j^{\infty}} \right) + \sum_{i,j} \delta \mathcal{T}_{ij} \left( \frac{\delta P_i}{P_i^{\infty}} - \frac{\delta P_j}{P_j^{\infty}} \right).
\end{aligned}$$

因 
$$\sum_i -\mathcal{T}_{ij}^{\infty} = 0,$$

所以

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j} \mathcal{T}_{ij}^{\infty} \left( \frac{\delta P_i}{P_i^{\infty}} \right) &= \sum_{i,j} \mathcal{T}_{ij}^{\infty} \left( \frac{\delta P_j}{P_j^{\infty}} \right) = 0, \\
\delta_A P &= \sum_{i,j} \left( \frac{\delta P_i}{P_i^{\infty}} - \frac{\delta P_j}{P_j^{\infty}} \right) \delta \mathcal{T}_{ij} = \frac{d(\delta^2 S)}{dt}.
\end{aligned}$$

若  $\delta^2 S$  作为 Ляпунов 函数, 则非线性远离平衡区 Master 方程的稳定性是根据“剩余熵产生”的大于零, 等于零, 小于零来判断。

### 三、Master 方程所决定的“概率流”的分解

上节讨论了 Master 方程(2.1)的稳定性问题, 这一节将进一步研究 Master 方程(2.1)的解随着时间变化的情况。特别是在线性近平衡区以及非线性远离平衡区定态附近。Master 方程(2.1)在稳定情况下, 主要变化趋势也就明确了。本节的结果与马氏链转移矩阵的分解有类似之处<sup>[2]</sup>。这里主要研究的是 Master 方程(2.1)所决定的“概率流”, 并给出它的分解具体表达式。

定义:  $\{P_i\}$  是 Master 方程(2.1)的解, 矩阵  $(P_i q_{ij})$  称为 Master 方程(2.1)所决定的“概率流”。

定义: 矩阵  $(P_{ij}(t))$ , 如果  $\forall i, j, P_{ij}(t) \equiv P_{ji}(t)$ , 则称为细致平衡矩阵。

定义: 矩阵  $(P_{ij}(t))$ , 如果  $\exists i_1, i_2, \dots, i_K, i_{K+1} = i_1 (K \geq 2) (i_{K_1} \rightleftharpoons i_{K_2}, \text{当 } K_1 \rightleftharpoons K_2)$  和  $Q(t)$ , 使得

$$P_{ij}(t) = \begin{cases} Q(t) & i = i_{K'}, j = i_{K'+1}, K' = 1, \dots, K, \\ 0 & \text{其他} \end{cases}$$

则称为环流矩阵。

定义: 矩阵  $(P_{ij}(t))$ , 如果  $\exists i_0$  和  $R(t)$ , 使得

$$P_{ij}(t) = \begin{cases} R(t) & i = i_0, j = i_0 + 1, -R(t) & i = i_0 + 1, j = i_0, \\ 0 & \text{其他} \end{cases}$$

则称为单流矩阵。

引理 1 若矩阵  $(P_{ij}(t))$  是环流矩阵, 则  $(Q(t)P_{ij}(t))$  也是环流矩阵.

引理 2 若矩阵  $(P_{ij}(t))$  是单流矩阵, 则  $(Q(t)P_{ij}(t))$  也是单流矩阵.

定理 3. 若  $\frac{dP_i}{dt} = \sum_j (P_i q_{ji} - P_i q_{ij})$ , 则“概率流”  $(P_i q_{ij}) = (T_{ij}(t)) + \sum_K (Q_{ij}^K(t))$   
 $+ \sum_l (R_{ij}^l(t))$ .

这里  $(T_{ij}(t))$  是细致平衡矩阵,  $(Q_{ij}^K(t))$  是环流矩阵的线性组合,  $(R_{ij}^l(t))$  是单流矩阵的线性组合.

证: 利用数学归纳法

当  $n = 2$  时, 显然.

设  $n = m - 1$  真,

当  $n = m$  时

$$(P_i q_{ij})_{m \times m} = \left( \frac{1}{2} (P_i q_{ij} + P_i q_{ji}) \right)_{m \times m} + \left( \frac{1}{2} (P_i q_{ij} - P_i q_{ji}) \right).$$

$$\text{设 } T_{ij} \triangleq \frac{1}{2} (P_i q_{ij} + P_i q_{ji}),$$

$$S_{ij} \triangleq \frac{1}{2} (P_i q_{ij} - P_i q_{ji}),$$

$$(P_i q_{ij}) = (T_{ij}) + (S_{ij}).$$

$$S_{ij} = -S_{ji}.$$

所以  
显然  
设

$$R_K = \begin{pmatrix} & K \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} K - 1,$$

$$R'_K = \begin{pmatrix} & K - 1 \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} K,$$

$$(S_{ij}) + \left( \frac{1}{2} \frac{dP_1}{dt} \right) (R_2 - R'_2)$$

$$= \begin{pmatrix} 0, & \frac{1}{2} \frac{dP_1}{dt} + S_{12}, S_{13}, \cdots, S_{1m} \\ -\frac{1}{2} \frac{dP_1}{dt} - S_1 & 0 & S_{23}, \cdots, S_{2m} \\ -S_{13} & -S_{23} & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ -S_{1m} & -S_{2m} & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

因 
$$\frac{dP_1}{dt} = -2(S_{12} + S_{13} + \cdots + S_{1m}),$$

故 
$$(S_{ij}) + \left(\frac{1}{2} \frac{dP_1}{dt}\right) (R_2 - R'_2) = \begin{pmatrix} 0 & -\sum_{K=3}^m S_{1K} & S_{13} \cdots S_{1m} \\ \sum_{K=3}^m S_{1K} & 0 & S_{23} \cdots S_{2m} \\ -S_{13} & -S_{23} & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ -S_{1m} & -S_{2m} & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

设 
$$Q_K = \begin{pmatrix} & & & K \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & 0 \\ & 0 & & I_{m-K} \end{pmatrix}_K, \quad Q'_K = \begin{pmatrix} & & & K \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & 1 \\ 1 & \cdots & \cdots & 0 \\ & 0 & & I_{m-K} \end{pmatrix}_K,$$

$$\begin{aligned} & (S_{ij}) + \left(\frac{1}{2} \frac{dP_1}{dt}\right) (R_2 - R'_2) - \sum_{K=3}^m S_{1K} (Q_K - Q'_K) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -\sum_{K=3}^m S_{1K} & S_{13} \cdots S_{1m} \\ \sum_{K=3}^m S_{1K} & 0 & S_{23} \cdots S_{2m} \\ -S_{13} & -S_{23} & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ -S_{1m} & -S_{2m} & \cdots & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -\sum_{K=3}^m S_{1K} & S_{13} \cdots S_{1m} \\ \sum_{K=3}^m S_{1K} & & \\ -S_{13} & & \\ \vdots & & \\ -S_{1m} & & \end{pmatrix} T \\ &= \begin{pmatrix} 0 & & & \\ 0 & S_{23}^1 \cdots S_{2m}^1 & & \\ S_{32}^1 & 0 & S_{3m}^1 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ S_{m2}^1 & S_{m3}^1 \cdots 0 & & \end{pmatrix} \triangleq (S_{ij}^1). \end{aligned}$$

这里

$$T = \begin{pmatrix} 0 & -\sum_{K=3}^m S_{1K} & 0 & \\ \sum_{K=3}^m S_{1K} & 0 & -\sum_{K=4}^m S_{1K} & 0 \\ 0 & \sum_{K=4}^m S_{1K} & 0 & \ddots \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & S_{1m} & 0 \end{pmatrix},$$

$$S_{ij}^1 = S_{ij}, \quad i \neq j+1 \text{ 或 } j = i+1.$$

故  $(Q_K - Q'_K)$  是反对称的, 并且每一行元素之和是零.

所以  $\sum_{K=3}^m S_{1K}(Q_K - Q'_K)$  也是反对称的, 并且每一行素之和也是零.

$(S_{ij}^1)$  第二行元素之和  $\sum_{K=3}^m S_{2K}^1$ , 等于  $(S_{ij})$  第二行元素之和加上  $\left(\frac{1}{2} \frac{dP_1}{dt}\right)(R_2 - R'_2)$  第

二行元素之和, 再减去  $\sum_{K=3}^m S_{1K}(Q_K - Q'_K)$  第二行元素之和.

即

$$\sum_{K=3}^m S_{2K}^1 = \sum_{\substack{K=1 \\ K \neq 2}}^m S_{2K} - \frac{1}{2} \frac{dP_1}{dt} - 0 = -\frac{1}{2} \frac{dP_2}{dt} - \frac{1}{2} \frac{dP_1}{dt},$$

$(S_{ij}^1)$  第  $i$  行元素之和  $\sum_{\substack{K=2 \\ K \neq i}}^m S_{iK}^1 (i > 2)$  保持不变等于  $-\frac{1}{2} \frac{dP_i}{dt}$ .

故可以设  $P_2^1 = P_1 + P_2$ ,  $P_i^1 = P_i (i > 2)$ , 得到

$$\frac{dP_i^1}{dt} = -2 \sum_{\substack{K=2 \\ K \neq i}}^m S_{iK}^1 \quad (i = 2, \dots, m).$$

根据数学归纳法定理证毕.

定理 3 中,

$$(T_{ij}) = \left( \frac{1}{2} (P_i q_{ij} + P_j q_{ji}) \right),$$

$$(Q_{ij}^K) = \left[ \sum_{l=3}^K S_{K-2,l}^{K-3} (Q_l^{K-3}) - \sum_{l=3}^K S_{K-2,l}^{K-3} (Q_l^{K-3}) \right] \quad (K \geq 3),$$

$$(R_{ij}^K) = \left( -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^{K-1} \frac{dP_l}{dt} (R_K - R'_K) \right) \quad (K \geq 2).$$

这里

$$Q_i^i = \left( \begin{array}{cc} \widehat{i} & \\ 0 & 0 \end{array} \right) \}^i.$$

定理 3 给出了 Master 方程(2.1) 所决定的“概率流”的具体分解方法和分解的解析表达式. 在这种分解方法下, “概率流”的分解是由细致平衡矩阵, 环流矩阵的线性组合和单流矩阵的线性组合而成. 分别称它们为“概率流”的细致平衡部分, 环流部分和单流部分<sup>[2]</sup>. 不难看出在这种分解意义下,  $\{P_i\}$  为平衡态, 当且仅当“概率流”分解仅有细致平衡部分.  $\{P_i\}$  为定态, 当且仅当“概率流”分解仅有细致平衡部分和环流部分.

自然, 这种“概率流”在空间和时间上应该反映出一定的宏观结构. 而这种结构的稳定性依赖“概率流”的稳定性, 也就是依赖着 Master 方程 (2.1) 中的各种参数. 随着不同而应有变化.

在本文写作过程中,北京师范大学量子力学小组,特别是沈小峰同志,以及数学系概率论教研组的同志参加了讨论,作者在此表示感谢。

### 参 考 文 献

- [1] 严士健,李占柄,物理学报, **29**(1980), 139.
- [2] 钱敏、侯振挺等著,可逆马尔可夫过程,湖南科学技术出版社, (1979).
- [3] G. Nicolis and I. Prigogine, *Self-Organization in Non-equilibrium Systems*, John Wiley & Sons, New York, (1977).
- [4] M. Malek-Mansour and G. Nicolis, *J. Stat. Phys.*, **13**(1975), 197.
- [5] G. Nicolis, M. Malek-Mansour, A. Van Nypelseer and K. Kitahara, *J. Stat. Phys.*, **14**(1976), 417.
- [6] S. Chaturvedi, C. W. Gardiner, I. S. Matheson and D. F. Walls, *J. Stat. Phys.*, **17**(1977), 469.
- [7] W. Horsthemke, M. Malek-Mansour and B. Hayez, *J. Stat. Phys.*, **16**(1977), 201.

## ON THE STABILITY OF THE MULTIVARIABLE MASTER EQUATION FOR NON-EQUILIBRIUM SYSTEMS

LI ZHAN-BING

(*Department of Mathematics, Peking Normal University*)

YAN SHI-JIAN

(*Department of Mathematics, Research Group of Quantum Mechanics, Peking Normal University*)

LIU RUO-ZHUANG

(*Department of Chemistry, Research Group of Quantum Mechanics, Peking Normal University*)

### ABSTRACT

In this paper, by using the concepts “entropy production” and “excess entropy production”, the Lyapunov stability of the master equation in linear and nonlinear range has been discussed. The results obtained are consistent with the stability theory of the time evolution equation of macroscopic non-equilibrium systems discussed by I. Prigogine. In addition, the concept of “probability flow” is proposed for the multivariable master equation of the stochastic model of non-equilibrium systems, and the method of decomposition of “probability flow” is given.