3. Satunnaisprosessien infinitesimaalisista generaattoreista

Tarkastelemme nyt jatkuva-aikaisten (Markov) prosessien rakentamista niiden käytöksestä infinitesimaalisella aikavälillä, eli prosessien infinitesimaalisia generaattoreita. Prosessin infinitesimaalinen generaattori voidaan tulkita kahdella tavalla: sen avulla ilmaistaan joko todennäköisyyksien tai observaabelien odotusarvojen differentiaalinen muutos. Infinitesimaalinen generaattori voidaan eksponentioida operaattoripuoliryhmäksi, joka antaa aikakehityksen äärellisellä aikavälillä.

Kuten edellä, tarkastelemme erikseen hyppyprosesseja ja jatkuvapolkuisia prosesseja — jälkimmäisille infinitesimaalinen generaattori on differentiaalioperaattori ja ensimmäisille tavallinen matriisi (tai differenssioperaattori).

Pyrimme tässä vain esittelemään tärkeimpiä käsitteitä ja ideoita infinitesimaalisista generaattoreista ja operaattoripuoliryhmistä, emme kehittämään yleisintä mahdollista matemaattista teoriaa. Poisson kelloihin perustuvien hyppyprosessien tapauksessa rajoitumme siksi äärellisiin tila-avaruuksiin, jolloin infinitesimaalinen generaattori on vain matriisi (äärellisulotteinen lineaarioperaattori).[6] Jatkuvapolkuisten prosessien eli diffuusioiden tapauksessa rajoitumme tapaukseen, jossa diffusiviteetti ja ajautuma eivät ole satunnaisia (erityisesti ne eivät riipu prosessin paikasta).[7]

3.1. Poisson-hyppyprosessien infinitesimaaliset generaattorit

Aloittakaamme seuraavalla lämmittelytehtävällä.

Tehtävä III.7. Olkoon $N = (N_t)_{t\geq 0}$ Poisson prosessi intensiteetillä λ. Satunnaismuuttujan $N_t \sim \mathrm{Poisson}(\lambda t)$ jakauma määräytyy todennäköisyyksistä $p_k(t) := \mathsf{P}[N_t = k]$. Osoita, että nämä todennäköisyydet toteuttavat differentiaaliyhtälösysteemin

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} p_k(t) = \lambda\, p_{k-1}(t) - \lambda\, p_k(t)\ , \text{ kun } k \in \mathbb{Z}_{>0}, \qquad \text{ja} \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} p_0(t) = -\lambda\, p_0(t).$$

Vihje: Aloita kirjoitamalla $p_k(t)$ eksplisiittisesti.

Luvun 2.4.2 hyppyprosessin tila ajanhetkellä t on satunnainen äärellisen joukon $\mathcal{S}$ alkio, sen jakauman määrittelevät todennäköisyydet

$$p_x(t) = \mathsf{P}[X_t = x], \qquad x \in \mathcal{S}.$$

Kuten Tehtävässä III.7, todennäköisyydet voidaan ratkaista differentiaaliyhtälöillä.

Tehtävä III.8. Olkoon $X = (X_t)_{t\in\mathbb{R}_{\geq 0}}$ hyppyprosessi äärellisellä joukolla $\mathcal{S}$, jonka hyppyintensiteetit ovat $\lambda_{x,y}$, $x, y \in \mathcal{S}$. Olkoon $p_x(t) = \mathsf{P}[X_t = x]$, $x \in \mathcal{S}$. Osoita, että

$$\forall x \in \mathcal{S},\ \forall t \geq 0 : \qquad p_x'(t) = \sum_{y\in\mathcal{S}} \Big(\lambda_{y,x} p_y(t) - \lambda_{x,y} p_x(t)\Big).$$

Vihje: Lausu esimerkiksi $\mathsf{P}[X_{t+h} = x] = \sum_{y\in\mathcal{S}} \mathsf{P}\big[X_{t+h} = x \,\big|\, X_t = y\big]\, \mathsf{P}[X_t = y]$.

[6] Numeroituvan tila-avaruuden tapaus ei ole juurikaan vaikeampi, mutta statistisessa fysiikassa useimmiten kiinnostavat nk. vuorovaikuttavat hiukkassysteemit vaativat edistyneempää teoriaa.

[7] Jatkuvapolkuisten prosessien yleisempi teoria tunnetaan stokastisena (Itô) analyysinä — se on tärkeää sekä statistisessa fysiikassa että vaikkapa finanssimatematiikassa.

Ylläolevan differentiaaliyhtälösysteemin ratkaisu on helpointa kirjoittaa matriisimuodossa. Kootaan todennäköisyydet vektoriksi $\underline{p}(t) = (p_x(t))_{x\in\mathcal{S}}$, jota ajatellaan rivivektorina, jonka komponentit on indeksoitu (äärellisellä) joukolla $\mathcal{S}$. Määritellään myös siirtymäintensiteettien avulla matriisi

$$\mathbf{G} = \Big(\lambda_{x,y} - \delta_{x,y}\sum_{z\in\mathcal{S}}\lambda_{x,z}\Big)_{x,y\in\mathcal{S}}, \tag{III.16}$$

jota sanotaan prosessin (X_t) infinitesimaaliseksi generaattoriksi. Tehtävän III.8 tulos voidaan kirjoittaa vektorimuodossa

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\underline{p}(t) = \underline{p}(t)\,\mathbf{G}. \tag{III.17}$$

Tämän yhtälön ratkaisu taas voidaan kirjoittaa matriisia $\mathbf{G}$ eksponentioimalla, kuten alla osoitamme.

3.1.1. *Matriisin eksponentioimisesta*

Matriisin $M \in \mathbb{R}^{n\times n}$ operaattorinormi määritellään

$$\|M\|_{\text{oper.}} = \sup\Big\{\|M\underline{v}\| \;\Big|\; \underline{v}\in\mathbb{R}^n,\ \|\underline{v}\|\le 1\Big\}.$$

Se on tosiaan normi lineaaripoeraattorien avaruudella

$$L(\mathbb{R}^n) = \{T\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n \text{ lineaarinen}\}$$

eli pätee

- $\|M\|_{\text{oper.}} = 0$ joss $M = 0$
- $\|M_1 + M_2\|_{\text{oper.}} \le \|M_1\|_{\text{oper.}} + \|M_2\|_{\text{oper.}}$
- $\|\lambda M\|_{\text{oper.}} = |\lambda| \times \|M\|_{\text{oper.}}$.

Pääasiallinen syy käyttää nimenomaan tätä normia on, että se kunnioittaa operaattorien yhdistämistä (eli matriisien kertolaskua) seuraavan epäyhtälön muodossa

- $\|M_1M_2\|_{\text{oper.}} \le \|M_1\|_{\text{oper.}}\,\|M_2\|_{\text{oper.}}$.

Äärellisulotteisessa avaruudessa $L(\mathbb{R}^n) \cong \mathbb{R}^{n^2}$ kaikki normit ovat ekvivalentteja, ja erityisesti toteamme avaruuden $(L(\mathbb{R}^n), \|\cdot\|_{\text{oper.}})$ olevan täydellinen: jos $(M^{(n)})_{n\in\mathbb{N}}$ on Cauchy-jono, (i,j):nnet komponentit $(M^{(n)}_{i,j})_{n\in\mathbb{N}}$ muodostavat Cauchy-jonoja $\mathbb{R}$:llä, ja siis komponentit suppenevat (ja lopulta matriisijono suppenee kohti sen komponenteittaista rajaa).

Lemma III.61. *Jos $M \in \mathbb{R}^{n\times n}$ on matriisi, niin sarja*

$$\exp(M) := \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}M^n$$

suppenee operaattorinormin mielessä.

Todistus. Osoitamme, että osasummat $\sum_{n=0}^{m} \frac{1}{n!} M^n$ muodostavat Cauchy-jonon. Jos $m_1 < m_2$, niin

$$\begin{aligned}\Big\| \sum_{n=0}^{m_2} \frac{1}{n!} M^n - \sum_{n=0}^{m_1} \frac{1}{n!} M^n \Big\|_{\text{oper.}} &= \Big\| \sum_{n=m_1+1}^{m_2} \frac{1}{n!} M^n \Big\|_{\text{oper.}} \\ &\leq \sum_{n=m_1+1}^{m_2} \frac{1}{n!} \|M^n\|_{\text{oper.}} \leq \sum_{n=m_1+1}^{m_2} \frac{1}{n!} \|M\|_{\text{oper.}}^n,\end{aligned}$$

missä käytimme normin ominaisuuksia, ja viimeisessä vaiheessa arviota yhdistetyn operaattorin normille. Saatu yläraja menee nollaan kun $m_1, m_2 \to \infty$, koska suppenevan reaalisen eksponenttisarjan $e^{\|M\|_{\text{oper.}}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \|M\|_{\text{oper.}}^n$ osasummat muodostavat Cauchy-jonon. □

3.1.2. *Generaattorin määräämä operaattoripuoliryhmä*

Olkoon $\mathbf{G}$ kaavan (III.16) määrittelemä matriisi — eli hyppyprosessimme infinitesimaalinen generaattori. Asetetaan, kaikilla $t \in \mathbb{R}$, Lemman III.61 suppenevaa sarjaa käyttäen

$$\mathbf{E}(t) = \exp\big(t\mathbf{G}\big) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n \, \mathbf{G}^n. \tag{III.18}$$

Propositio III.62. *Matriisit* $(\mathbf{E}(t))_{t\in\mathbb{R}}$ *muodostavat operaattori(puoli)ryhmän*[8]*, jonka generaattori on* $\mathbf{G}$*:*

(a) $\mathbf{E}(0) = \mathbb{I}$ *on yksikkömatriisi (identiteettioperaattori)*
(b) *kaikilla* $s, t \in \mathbb{R}$ *pätee* $\mathbf{E}(t+s) = \mathbf{E}(t)\mathbf{E}(s)$
(c) *kuvaus* $t \mapsto \mathbf{E}(t)$ *on jatkuva*
(d) $\mathbf{E}'(t) := \lim_{h\to 0} \frac{1}{h}\big(\mathbf{E}(t+h) - \mathbf{E}(t)\big) = \mathbf{E}(t)\,\mathbf{G} = \mathbf{G}\,\mathbf{E}(t)$.

Todistus. Ominaisuus (a) on selvä. Ominaisuus (b) seuraa uudelleenjärjestelemällä Lemman III.61 eksponenttisarjan termejä kuten reaalisessakin tapauksessa.

Jatkuvuus pisteessä $t = 0$ nähdään arviosta

$$\big\| \exp(h\mathbf{G}) - \mathbb{I} \big\|_{\text{oper.}} = \Big\| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{h^n}{n!} \mathbf{G}^n \Big\|_{\text{oper.}} \leq \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|h|^n}{n!} \|\mathbf{G}\|_{\text{oper.}}^n = e^{|h|\,\|\mathbf{G}\|_{\text{oper.}}} - 1 \underset{h\to 0}{\longrightarrow} 0.$$

Ominaisuus (c), eli jatkuvuus kaikissa pisteissä t seuraa ominaisuudesta (b) ja arviosta

$$\big\|\mathbf{E}(t+h) - \mathbf{E}(t)\big\|_{\text{oper.}} = \big\|\big(\mathbf{E}(h) - \mathbb{I}\big)\mathbf{E}(t)\big\|_{\text{oper.}} \leq \underbrace{\|\mathbf{E}(h) - \mathbb{I}\|_{\text{oper.}}}_{\longrightarrow 0 \text{ kun } h\to 0} \, \|\mathbf{E}(t)\|_{\text{oper.}}.$$

Differentioituvuus ja derivaatta pisteessä $t = 0$ saadaan arviosta

$$\begin{aligned}\Big\| \frac{1}{h}\big(\exp(h\mathbf{G}) - \mathbb{I}\big) - \mathbf{G} \Big\|_{\text{oper.}} &= \Big\| \sum_{n=2} \frac{h^{n-1}}{n!} \mathbf{G}^n \Big\|_{\text{oper.}} \leq \sum_{n=2} \frac{|h|^{n-1}}{n!} \|\mathbf{G}\|_{\text{oper.}}^n \\ &= \frac{1}{|h|}\Big(e^{|h|\,\|\mathbf{G}\|_{\text{oper.}}} - |h|\,\|\mathbf{G}\|_{\text{oper.}} - 1\Big) = \mathcal{O}(|h|) \underset{h\to 0}{\longrightarrow} 0\end{aligned}$$

Ominaisuus (d), eli differentioituvuus kaikissa pisteissä t, seuraa jälleen tästä ja ominaisuudesta (b). □

[8] Tässä tapauksessa matriisit muodostavat itseasiassa ryhmän, matriisin $\mathbf{E}(t)$ käänteismatriisi on $\mathbf{E}(-t)$. Käytämme termiä operaattoripuoliryhmä, koska useissa tärkeissä yleistyksissä voidaan tarkastella ainoastaan operaattoreita $\mathbf{E}(t)$, $t \geq 0$, joiden kokoelma toteuttaa ainoastaan puoliryhmältä vaaditut ominaisuudet.

Prosessimme $(X_t)_{t\in[0,\infty)}$ infinitesimaalisesta generaattorista $\mathbf{G}$ konstruoitu operaattoripuoliryhmä $(\mathbf{E}(t))_{t\in\mathbb{R}}$ pitää ytimekkäästi sisällään kaiken siitä, miten todennäköisyydet löytää prosessi eri tiloista eri ajanhetkillä määräytyvät. Tarkemmin tämän sanoo seuraava lause.

Lause III.63. *Yhtälön* (III.17) *yksikäsitteinen ratkaisu alkuehdolla* $\underline{p}(0)$ *on*

$$\underline{p}(t) = \underline{p}(0)\,\mathbf{E}(t).$$

Todistus. Se, että oikea puoli toteuttaa yhtälön (III.17) voidaan laskea brutaalisti komponenteittain, käyttäen Proposition III.62 ominaisuutta (d). Ratkaisun yksikäsitteisyys seuraa tavallisten differentiaaliyhtälöiden teoriasta. □

3.1.3. *Generaattorin tulkinta observaabelien odotusarvojen muutoksina*

Prosessin generaattori $\mathbf{G}$ määrää siis differentiaaliyhtälösysteemin (III.17) avulla sen, miten todennäköisyydet olla eri tiloissa muuttuvat ajan funktioina. Generaattorilla on myös duaalinen tulkinta: se kertoo, miten "observaabelien"[9] odotusarvot muuttuvat ajan funktioina.

Olkoon $f\colon \mathcal{S}\to\mathbb{R}$ funktio, joka ajatellaan sarakevektorina $f = (f(x))_{x\in\mathcal{S}}$. Usein halutaan evaluoida funktioita f prosessin satunnaisessa tilassa $X_t \in \mathcal{S}$ ajanhetkellä t, ja laskea saatujen reaaliarvoisten satunnaismuuttujien odotusarvoja $\mathsf{E}[f(X_t)]$. Tällaiset odotusarvot voidaan kirjoittaa muodossa

$$\mathsf{E}[f(X_t)] = \sum_{x\in\mathcal{S}} p_x(t) f(x) = \sum_{x,y\in\mathcal{S}} p_y(0)\,(\mathbf{E}(t))_{y,x}\, f(x) = \underline{p}(0)\,\mathbf{E}(t)\, f,$$

jossa esiintyy (vain) prosessin alkutila $\underline{p}(0)$, aikakehitysmatriisi $\mathbf{E}(t) = \exp(t\mathbf{G})$ ja tietenkin funktio f. Derivoimalla ajan t suhteen saadaan usein hyödyllinen odotusarvojen infinitesimaalisia muutoksia koskeva kaava

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathsf{E}[f(X_t)] = \sum_{x,y,z\in\mathcal{S}} p_y(0)\,(\mathbf{E}(t))_{y,x}\,\mathbf{G}_{x,z}\, f(z) = \mathsf{E}[(\mathbf{G}f)(X_t)], \qquad \text{(III.19)}$$

missä infinitesimaalinen generaattori $\mathbf{G}$ operoi funktioon f ilmeisellä tavalla, $(\mathbf{G}f)(x) = \sum_z \mathbf{G}_{x,z} f(z)$.

Huomautus III.64. Operaattoripuoliryhmät esiintyvät paljon yleisemmässä konteksteissa kuin tämän luvun äärellistilaisten jatkuva-aikaisten satunnaisprosessien tapauksessa. Tärkeitä sovelluksia ovat muun muassa:

- *Vuorovaikuttavat hiukkassysteemit yleisemmillä tila-avaruuksilla*: Vuorovaikuttavan hiukkassysteemin tila-avaruus $\mathcal{S}$ voi olla esimerkiksi kaikkien d-ulotteisen Ising mallin spinkonfiguraatioiden joukko $\{-1,+1\}^{\mathbb{Z}^d}$, ja prosessin $(X_t)_{t\in[0,\infty)}$ voitaisiin haluta mallintavan lämpöliikkeen aiheuttamia spin-konfiguraatioiden muutoksia. Tällaiset tila-avaruudet ovat ylinumeroituvia (joskin edelleen kompakteja täydellisiä metrisiä avaruuksia), ja stokastisen prosessin $(X_t)_{t\in[0,\infty)}$ määritteleminen johtaa hieman teknisiin pohdintoihin. Stokastisen prosessin konstruktio aloitetaan itseasiassa tavallisesti antamalla generaattori $\mathbf{G}$, joka ajatellaan operaattorina tila-avaruudella määriteltyjen funktioiden joukossa, ja tutkimalla $\mathbf{G}$:n määrittelemää operaattoripuoliryhmää $\mathbf{E}(t) = \exp(t\mathbf{G})$.

[9] Tässä observaabeli tarkoittaa yksinkertaisesti prosessin tilasta riippuvaa funktiota, jonka arvo muuttuu prosessin tilan muuttuessa, ja jonka odotusarvoista olemme kiinnostuneita.

- *Kvanttimekaniikka*: Kvanttimekaanisen systeemin tila ajanhetkellä t on Hilbert-avaruuden $\mathcal{H}$ vektori $\psi(t)$. Systeemin fysiikan määrää Hamiltonin operaattori, itseadjungoitu lineaarioperaattori $H\colon \mathcal{H} \to \mathcal{H}$. Systeemin tilan aikakehitys saadaan Schrödingerin yhtälöstä
$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \psi(t) = H\, \psi(t)$$
(vrt. yhtälöön (III.17)). Ratkaisu on helpointa esittää unitaaristen operaattorien $\mathbf{E}(t) = \exp(\mathrm{i}tH/\hbar)$ avulla muodossa $\psi(t) = \mathbf{E}(t)\, \psi(0)$. Aikakehitysoperaattorit $(\mathbf{E}(t))_{t \geq 0}$ muodostavat unitaarisen operaattori(puoli)ryhmän.

Huomautetaan, että ylläolevissa esimerkeissä puoliryhmän generaattori $\mathbf{G}$ on yleensä rajoittamaton lineaarioperaattori Banach-avaruudella. Silloin, kun generaattori sattuu olemaan rajoitettu, tekemämme tarkastelut yleistyvät melko suoraviivaisesti. Muussa tapauksessa joudutaan funktionaalianalyysiin.