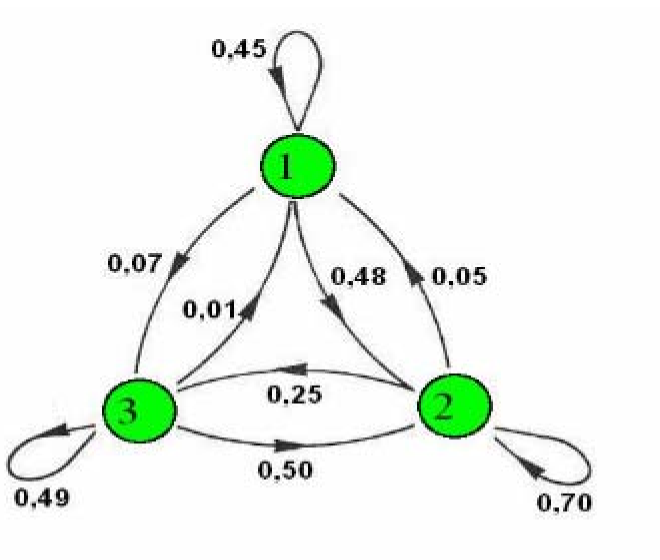
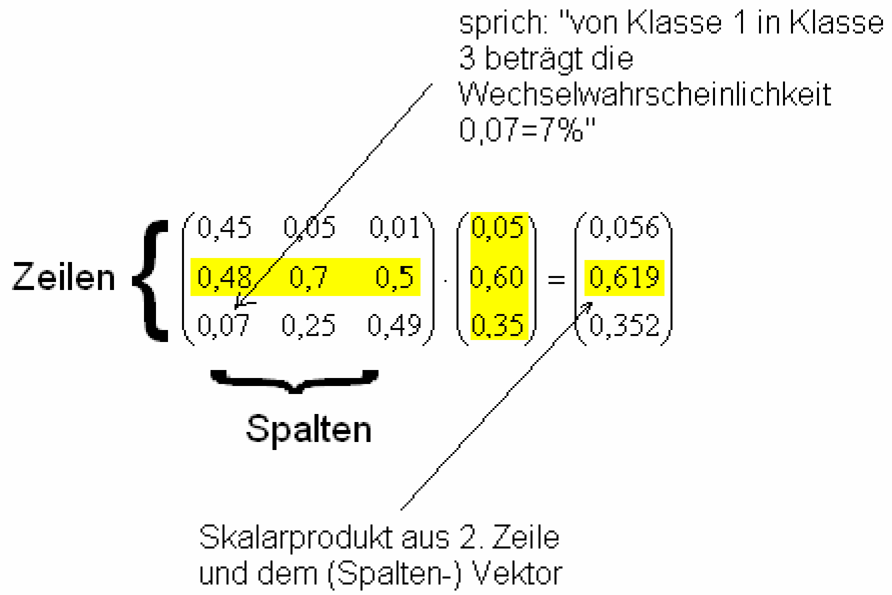
Austausch- bzw. Übergangsprozesse und Gleichgewichtsverteilungen



Wir betrachten ein System mit 3 verschiedenen Zuständen, zwischen denen ein „Austausch“ stattfinden kann. Etwa soziale Schichten in einer Gesellschaft: 1 = Oberschicht, 2 = Mittelschicht und 3 = Unterschicht.
Das nebenstehende Diagramm gibt an, wie stark diese Umverteilungen im Laufe von 10 Jahren sind: 45% bleiben in der Oberschicht (Pfeil von 1 kehrt zurück), 48% wandern von 1 in die Mittelschicht usw. Zu einem gegeben Zeitpunkt befinden sich 5% in der Oberschicht, 60% in der Mittelschicht und 35% in der Unterschicht. Wie ist die Verteilung nach 10 Jahren, d.h. wie groß ist der Anteil der Oberschicht (p_1), Mittelschicht (p_2) bzw. Unterschicht (p_3) dann? Dazu muss man folgende (lineare) Gleichungen berechnen:

$$p_1 = 0{,}05 \cdot 0{,}45 + 0{,}60 \cdot 0{,}05 + 0{,}35 \cdot 0{,}01 = 0{,}056$$
$$p_2 = 0{,}05 \cdot 0{,}48 + 0{,}60 \cdot 0{,}70 + 0{,}35 \cdot 0{,}50 = 0{,}619$$
$$p_3 = 0{,}05 \cdot 0{,}07 + 0{,}60 \cdot 0{,}25 + 0{,}35 \cdot 0{,}49 = 0{,}352$$

Man berechnet also jeweils das Produkt aus dem aktuellen Anteil der sozialen Schicht zu Beginn mal der „Wechselwahrscheinlichkeit“. Die Summe dieser drei Anteile ergibt den Prozentsatz nach 10 Jahren. Diese drei linearen Gleichungen können auch kompakt mit Hilfe einer **Matrix** ausgedrückt werden:



Eine Matrix[1] ist ein rechteckiges Zahlenschema. In unserem Fall werden die Übergangswahrscheinlichkeiten in sie eingetragen. Man definiert die Multiplikation zwischen einer Matrix mit *n* Zeilen und *m* Spalten und einem Vektor mit *m* Komponenten als Vektor mit *n* Komponenten. Die i-te Komponente entsteht durch das Skalarprodukt des Vektors mit der i-ten Zeile. In unserem Beispiel sind *m*=3 und *n*=3 und es ergibt etwa das Skalarprodukt aus der 2. Zeile mit dem Vektor der Anfangsverteilung die 2. Komponente der Endverteilung (siehe farbliche Markierung in obiger Abbildung).

Interessiert man sich für die Verteilung der sozialen Schichten nach weiteren 10 Jahren, muss der „Verteilungsvektor" noch einmal mit der Übergangsmatrix multipliziert werden:

$$\begin{pmatrix} 0{,}45 & 0{,}05 & 0{,}01 \\ 0{,}48 & 0{,}7 & 0{,}5 \\ 0{,}07 & 0{,}25 & 0{,}49 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0{,}056 \\ 0{,}619 \\ 0{,}352 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0{,}060 \\ 0{,}636 \\ 0{,}331 \end{pmatrix}$$

Wiederholt man diesen Vorgang findet man „in der Regel", dass sich eine sog. „Grenzverteilung" einstellt, ab der sich der Wert nicht mehr ändert: $M \cdot \vec{g} = \vec{g}$ - und zwar unabhängig vom Startvektor! Hier gilt also, dass die „Anwendung der Matrix" (anderer Ausdruck für „Multiplikation mit der Matrix") den Vektor nicht mehr ändert! Symbolisch: $\lim_{n\to\infty} \vec{x}_n = \vec{g}$ mit $M \cdot \vec{x}_n = \vec{x}_{n+1}$. Die Verteilung $\vec{g}$ stellt also den „Endpunkt" der Zeitentwicklung dar und wird deshalb auch stationäre Verteilung der Übergangsmatrix genannt! Wie man sie systematisch bestimmen kann, werden wir gleich behandeln. Zuvor betrachten wir jedoch:

Multiplikation von Matrizen mit Matrizen

Bisher haben wir nun den Fall „Matrix mal Vektor" betrachtet. Das Produkt einer Matrix mit einem Startvektor $\vec{x}_0$ hat den Zustand zum nächsten Zeitschritt ergeben: $M \cdot \vec{x}_0 = \vec{x}_1$ und so weiter: $M \cdot \vec{x}_1 = \vec{x}_2$. Diese letzte Gleichung kann man natürlich auch so schreiben: $M \cdot (M \cdot \vec{x}_0) = \vec{x}_2$. Es stellen sich hier zwei zusammenhängende Fragen, nämlich ob man auch eine Matrix finden kann, die den Startvektor $\vec{x}_0$ direkt in den Vektor $\vec{x}_2$ überführt und zweitens, ob die Matrizen *M* in dem Ausdruck $M \cdot (M \cdot \vec{x}_0) = \vec{x}_2$ auch multipliziert werden können. Schreiben wir den Ausdruck für eine 2x2 Matrix einfach in Komponenten aus (wir schreiben $\vec{x}_0 = \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}$):

$$M \cdot (M \cdot \vec{x}_0) = \vec{x}_2$$

$$\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_0 m_{11} + y_0 m_{12} \\ x_0 m_{21} + y_0 m_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} m_{11}(x_0 m_{11} + y_0 m_{12}) + m_{12}(x_0 m_{21} + y_0 m_{22}) \\ m_{21}(x_0 m_{11} + y_0 m_{12}) + m_{22}(x_0 m_{21} + y_0 m_{22}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix}$$

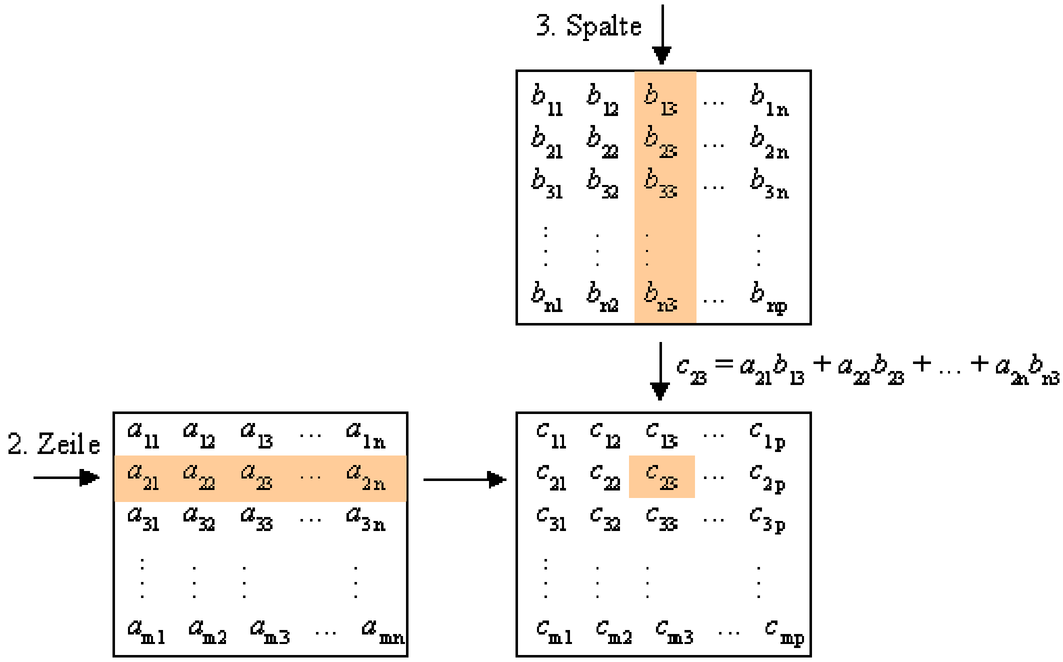
$$\begin{pmatrix} m_{11}m_{11} + m_{12}m_{21} & m_{11}m_{12} + m_{22}m_{12} \\ m_{21}m_{11} + m_{21}m_{22} & m_{21}m_{12} + m_{22}m_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = (M \cdot M)\vec{x}_0 = \vec{x}_2$$

[1] Plural: Matrizen

Dieser Ausdruck (die große Matrix) sieht kompliziert aus – ist es aber gar nicht! Sie deuten wir als das Produkt aus M mit sich selbst (also M^2, *sprich „M-Quadrat“*). Es ist die gesucht Matrix, d.h. jene, die mit der Verteilung $\vec{x}_0$ multipliziert direkt $\vec{x}_2$ ergibt! Man definiert das Produkt von zwei Matrizen ganz allgemein:

- Sei A eine Matrix mit m Zeilen und n Spalten und
- sei B eine Matrix mit n Zeilen und p Spalten[2].
- Dann definiert man das Produkt $A \cdot B = C$ als die Matrix, deren Komponente c_{ij} (d.h. i-te Zeile und j-te Spalte) durch das Skalarprodukt aus der i-ten Zeile von A und der j-ten Spalte von B entsteht.

Die folgende Abbildung illustriert diese Rechenvorschrift noch einmal: $A \cdot B = C$, mit:



Wir können nun einen neuen Blick auf unsere Grenzverteilung werfen! Wir haben gesehen, dass in der Regel die Verteilung $\vec{x}_n$ mit wachsendem n einen festen Wert $\vec{g}$ annimmt, und zwar unabhängig von der Startverteilung! Diese Serie von Verteilungen entsteht aber durch wiederholte Anwendung der Matrix M auf den Startvektor, d.h. $M^n \cdot \vec{x}_0 = \vec{x}_n$. Zu der Grenzverteilung muss also eine „Grenzmatrix“ $\lim\limits_{n\to\infty} M^n = G$ gehören, für die $G \cdot \vec{x}_0 = \vec{g}$ gilt! Diese Gleichung sieht seltsam aus. Wie kann eine Matrix (G) einen *beliebigen* Startvektor auf den festen Vektor $\vec{g}$ abbilden? Offensichtlich müssen alle Spalten identisch sein! In einem einfachen 2x2 Beispiel:

$$\begin{pmatrix} a & a \\ b & b \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a(x_0 + y_0) \\ b(x_0 + y_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

[2] Wir betrachten hier gerade Vorgänge, bei denen alle Zustände in alle anderen übergehen können. Unsere Matrizen sind also „quadratisch“, d.h. haben genauso viele Zeilen wie Spalten!

Die Summe aus x_0 und y_0 ist 1 („Wahrscheinlichkeitsbedingung“) und die identischen Spalten der Grenzmatrix sind also identisch mit der Grenzverteilung $\vec{g}$! Betrachten wir ein numerisches Beispiel:

$$\begin{pmatrix} 0{,}7 & 0{,}5 \\ 0{,}3 & 0{,}5 \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} 0{,}64 & 0{,}6 \\ 0{,}36 & 0{,}4 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0{,}7 & 0{,}5 \\ 0{,}3 & 0{,}5 \end{pmatrix}^3 = \begin{pmatrix} 0{,}628 & 0{,}62 \\ 0{,}372 & 0{,}38 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0{,}7 & 0{,}5 \\ 0{,}3 & 0{,}5 \end{pmatrix}^4 = \begin{pmatrix} 0{,}6256 & 0{,}624 \\ 0{,}3744 & 0{,}376 \end{pmatrix}$$

Mit wachsender Potenz nähert sich diese Matrix tatsächlich einer Grenzmatrix an, deren Spaltenvektoren identisch sind! Multipliziert man einen beliebigen Vektor mit dieser Matrix, dessen Komponenten die Summe 1 haben, ergibt sich als Ergebnis immer dieser Spaltenvektor! Dasselbe Beispiel wird uns auch im nächsten Abschnitt begegnen:

Berechnung einer stationären Verteilung

Natürlich kann man sich auch sofort auf die Suche nach einem Vektor machen, der die Gleichung $M \cdot \vec{x} = \vec{x}$ erfüllt. Es handelt sich schließlich um ein lineares Gleichungssystem. Betrachten wir ein Beispiel mit einer 2x2 Übergangsmatrix: Gesucht wird der Vektor (x_1, x_2), für den gilt:

$$\begin{pmatrix} 0{,}7 & 0{,}5 \\ 0{,}3 & 0{,}5 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

$$0{,}7x_1 + 0{,}5x_2 = x_1$$
$$0{,}3x_1 + 0{,}5x_2 = x_2$$

$$-0{,}3x_1 + 0{,}5x_2 = 0$$
$$0{,}3x_1 - 0{,}5x_2 = 0$$

$$x_2 = 0{,}6 \cdot x_1$$

Man sieht, dass diese Gleichungen nicht unabhängig sind: sie sind jeweils das (-1)-fache von einander. Sie können also die Werte für x_1 und x_2 noch nicht eindeutig festlegen. Allerdings wissen wir zusätzlich, dass $x_1 + x_2 = 1$ gilt. Zusammen also:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0{,}625 \\ 0{,}375 \end{pmatrix}$$

Dieser Vektor ist also der „stationäre“ Vektor dieser Übergangsmatrix. Gleichzeitig handelt es sich um den Grenzvektor bzw. die Grenzverteilung $\vec{g}$ dieser Übergangsmatrix für beliebige Startvektoren (siehe Beispiel oben).

Noch einige Anmerkungen und Spezialfälle

- Eine Verteilung für die $M \cdot \vec{x} = \vec{x}$ gilt nennt man stationäre Verteilung (bzw. Eigenvektor der Matrix M zum Eigenwert 1). Allgemein nennt man nämlich einen Vektor $\vec{x} \neq \vec{0}$, der die Gleichung $M \cdot \vec{x} = \lambda \cdot \vec{x}$ (mit λ einer reellen Zahl) erfüllt, einen „Eigenvektor“ der Matrix M zum „Eigenwert“ λ.
- Wiederholt man die Anwendung einer Übergangsmatrix auf einen Vektor kann sich unabhängig vom Startvektor eine stabile Verteilung ergeben – man nennt sie Grenzverteilung. Symbolisch: $M \cdot \vec{x}_n = \vec{x}_{n+1}$ und $\lim\limits_{n\to\infty} \vec{x}_n = \vec{g}$. Für diesen Vektor gilt also: $M \cdot \vec{g} = \vec{g}$. Die Grenzverteilung ist also ebenfalls eine stationäre Verteilung. Da die wiederholte Anwendung des Vektors auch als Anwendung des Startvektors auf das n-fache Produkt der Übergangsmatrix ausgedrückt werden kann, gilt ebenso: $\lim\limits_{n\to\infty} M^n = G$, mit G der „Grenzmatrix“, die die Bedingung $G \cdot \vec{x}_0 = \vec{g}$ erfüllt. Dies bedeutet, dass ein beliebiger Startvektor auf den Grenzvektor abgebildet wird! Allerdings muss dieser Grenzwert nicht immer existieren bzw. nicht jede Übergangsmatrix besitzt eine Grenzmatrix. Es gilt der mathematische Satz: *Wenn in irgendeiner Potenz der Übergangsmatrix M alle Elemente von Null verschieden sind, existiert die Grenzmatrix und besteht aus lauter gleichen Spalten.*
- Wie oben schon erwähnt, besitzt nicht jede Übergangsmatrix eine Grenzmatrix bzw. eine zugehörige Grenzverteilung. Beispiel: $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. Diese Matrix vertauscht abwechselnd die Komponenten der Startvektoren und ihre Potenzen haben ebenfalls keinen Grenzwert!
- Die obige Matrix $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ hat mit dem Vektor $\begin{pmatrix} 0{,}5 \\ 0{,}5 \end{pmatrix}$ trotzdem eine stationäre Verteilung! Wir sehen also: jede Grenzverteilung ist stationär, aber nicht jede stationäre Verteilung ist Grenzverteilung. Beide Begriffe können sinnvoll unterschieden werden. Das sieht man auch am nächsten Beispiel:
- Für die Einheitsmatrix $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ ist jeder Vektor stationär, aber ein beliebiger Startvektor wird nicht auf eine feste Grenzverteilung abgebildet, sondern auf sich selbst! Gleichzeitig handelt es sich um keine Grenzverteilung, da die Spalten verschieden sind.