Internat. Math. Nachrichten
Nr. 209 (2008), 1–14

Entropiemethoden für nichtlineare partielle Differentialgleichungen

Ansgar Jüngel und Daniel Matthes
TU Wien

1 Einleitung

Evolutionsgleichungen sind partielle Differentialgleichungen, die die zeitliche Entwicklung von physikalischen Größen beschreiben. Evolutionsgleichungen sind von zentralem Interesse in der Angewandten Mathematik, insbesondere im Hinblick auf ihre mannigfache Verwendung in Physik, Chemie, Biologie und in den Ingenieurs- Sozial- und Wirtschaftswissenschaften. Einige Anwendungsbeispiele sind die Beschreibung der Elektronenbewegung in Transistoren und Speicherbauteilen, die Untersuchung von Phasengrenzen in chemischen Reaktionen, die Quantifizierung des Wachstums von biologischen Zellen und die Optimierung der Aerodynamik um Flugzeugflügel. Das mathematische Ziel ist die Analysis der entsprechenden (meist nichtlinearen) partiellen Differentialgleichungen. Hauptschwerpunkte sind der Beweis der Wohlgestelltheit der zugehörigen Anfangs- bzw. Randwertprobleme sowie die Beschreibung des qualitativen Verhaltens der Lösungen, vor allem im Langzeitregime.

In einer Vielzahl von Modellen haben die typischen Lösungen die Tendenz, gegen einen gewissen Gleichgewichtszustand zu streben. Meist lässt sich diese Tendenz durch ein thermodynamisches Prinzip erklären: Mit zunehmender Zeit führt die Interaktion der Teilchen eines (geschlossenen) Systems zur Erhöhung der sogenannten *Entropie*, die gemeinhin als ein „Maß der Unordnung“ verstanden wird.[1] Das Gesetz der Zunahme der Entropie in geschlossenen thermodynamischen Systemen wurde 1865 von Clausius entdeckt und von Boltzmann in den 1870er-Jahren statistisch interpretiert. Das Maximum der Entropie (unter den für das Sys-

[1] Dies ist ein bekanntes Phänomen auf dem eigenen Büroschreibtisch: Mit zunehmender Zeit nimmt die Unordnung zu.

ISSN 0020-7926

tem charakteristischen Nebenbedingungen) wird gemäß des Gibbs-Prinzips in der Gleichgewichtsverteilung erreicht, wenn also alle makroskopischen Größen des beschriebenen Systems stationäre Werte annehmen.

Wir wollen im Folgenden erläutern, welche Rolle die Entropie in einigen partiellen Differentialgleichungen spielt und inwieweit Methoden, die auf dem Entropiekonzept beruhen, zu neuen mathematischen Resultaten oder eleganten Beweisen bekannter Ergebnisse führen können. Aus Platzgründen beschränken wir uns auf einige grundlegende Beispiele und gehen nicht auf die zahllosen neuen Entwicklungen und Anwendungen von Entropiemethoden in Funktionalanalysis, Stochastik und Massentransporttheorie ein; wir verweisen die interessierten LeserInnen auf die exzellenten Bücher [1] und [13].

Im folgenden Abschnitt erläutern wir die Verwendung der Entropie in der kinetischen Theorie von Boltzmann. Die Entropie wird in Abschnitt 3 benutzt, um exemplarisch das Langzeitverhalten von Lösungen der linearen Fokker-Planck-Gleichung zu beschreiben und nebenbei die logarithmische Sobolev-Ungleichung zu beweisen. Verallgemeinerungen und weitere Anwendungen werden in Abschnitt 4 diskutiert. Schließlich stellen wir in Abschnitt 5 eine Methode vor, wie neue Entropien auf algorithmischem Wege gewonnen werden können.

2 Die Boltzmann-Gleichung und Entropie

Ein Gas oder eine Flüssigkeit kann auf mikroskopischer Ebene durch die Dichtefunktion f beschrieben werden; dabei gibt $f(t;x,v)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür an, zur Zeit $t \geq 0$ ein Teilchen am Ort $x \in \mathbb{R}^3$ mit Geschwindigkeit $v \in \mathbb{R}^3$ zu finden. Gemäß der kinetischen Theorie erfüllt f die 1872 von Boltzmann formulierte Gleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f + F(x) \cdot \nabla_v f = Q(f),$$

wobei $F(x)$ eine auf die Teilchen wirkende Kraft und $Q(f)$ die Geschwindigkeitsänderungen von Teilchen aufgrund von Kollisionen beschreibt. Typischerweise ist Q von der Form

$$(Q(f))(v) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{|\omega|=1} \sigma(\omega, |v - v_*|)\big(f(v')f(v'_*) - f(v)f(v_*)\big)d\omega\, dv_*,$$

worin v, v_* die Geschwindigkeiten der kollidierenden Teilchen *vor* dem Stoß und v', v'_* die *nach* dem Stoß sind. Diese Stöße erhalten – nach den Gesetzen der klassischen Mechanik – Impuls und Energie, also $v + v_* = v' + v'_*$ und $|v|^2 + |v_*|^2 = |v'|^2 + |v'_*|^2$. Die genaue Form der Kollisionsrate σ hängt von der Art der Teilchen ab und muss aus einer mikroskopischen Theorie bestimmt werden. Oft ist sie eine Funktion der Geschwindigkeitsdifferenz $|v - v_*|$ und des Stoßwinkels ω.

Wir betrachten den einfachsten Fall: ohne äußere Kräfte, $F \equiv 0$, und für räumlich homogene Dichten, $f(t;x,v) = f(t;v)$. Die Anfangsdaten sind entsprechend durch $f(0;x,v) = f_0(v)$ gegeben. Als Wahrscheinlichkeitsdichte ist $\int_{\mathbb{R}^3} f_0(v)\,dv = 1$ erfüllt, und wir setzen voraus, dass der makroskopische Impuls verschwindet ($\int_{\mathbb{R}^3} v f_0(v)\,dv = 0$) und die Temperatur normiert ist ($\int_{\mathbb{R}^3} |v|^2 f_0(v)\,dv = 1$). Die mikroskopischen Erhaltungsgesetze für Energie und Impuls sorgen dafür, dass sich auch der makroskopische Impuls und die Temperatur nicht in der Zeit ändern.

Es stellt sich nun die Frage, ob die Funktion $f(t)$ für $t \to \infty$ gegen eine Grenzfunktion f_∞ konvergiert. Da die mikroskopischen Wechselwirkungen der Teilchen reversibel sind, ist zunächst nicht klar, warum $f(t)$ eine Tendenz in Richtung eines Gleichgewichts entwickeln sollte – und ob überhaupt ein Gleichgewicht f_∞ existiert. Diese Fragen können mittels des Entropie-Konzepts beantwortet werden.

Die *Entropie*[2] ist definiert durch

$$H[f] = \int_{\mathbb{R}^3} f \log f \, dv, \tag{1}$$

und die Funktion $t \mapsto H[f(t)]$ ist monoton fallend:[3]

$$\begin{aligned}
\frac{dH[f(t)]}{dt} &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial f}{\partial t} \log f \, dv = \int_{\mathbb{R}^3} Q(f) \log f \, dv \\
&= -\int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{|\omega|=1} \sigma \big(f(v') f(v'_*) - f(v) f(v_*) \big) \log \frac{f(v') f(v'_*)}{f(v) f(v_*)} \, d\omega \, dv \, dv_* \\
&\leq 0.
\end{aligned}$$

Diese Eigenschaft wird auch als das *H-Theorem* von Boltzmann bezeichnet. In der Menge der Wahrscheinlichkeitsdichten mit Impuls null und Temperatur eins wird das (strikt konvexe) Funktional H durch die Maxwellverteilung

$$f_\infty(v) = (2\pi)^{-3/2} e^{-|v|^2/2}$$

minimiert. Aus obiger Rechnung folgt zunächst zwar nur, dass $H[f(t)]$ monoton fällt, aber es ist nicht schwer zu folgern, dass für $t \to \infty$ tatsächlich $H[f(t)]$ gegen $H[f_\infty]$ konvergiert.

Impliziert dies bereits $f(t) \to f_\infty$ in einer geeigneten Topologie? Ja, denn mithilfe der Csiszár-Kullback-Ungleichung

$$\|f(t) - f_\infty\|_{L^1(\mathbb{R}^d)} \leq \sqrt{8} \sqrt{H[f(t)] - H[f_\infty]} \tag{2}$$

[2] Eigentlich handelt es sich um die *negative* Entropie, aber es ist hier zweckmäßiger, das Funktional wie oben zu definieren.

[3] Wir nehmen hier und im Folgenden an, dass die entsprechende Gleichung eine hinreichend oft differenzierbare Lösung besitzt, um technische Details auszusparen und die grundlegenden Ideen herauszustellen.

kann die L^1-Norm der Differenz mit der Entropie abgeschätzt werden. Da $f(t)$ und f_∞ Wahrscheinlichkeitsdichten sind, ist der L^1-Abstand in diesem Zusammenhang ein sehr natürliches Maß für den Abstand zum Gleichgewicht.

Die Frage, wie schnell $f(t)$ gegen f_∞ konvergiert, ist allerdings deutlich schwieriger zu beantworten. Im Allgemeinen kann keine exponentielle Konvergenz erwartet werden (Resultat von Bobylev). Desvillettes und Villani haben unter bestimmten Voraussetzungen gezeigt, dass die Konvergenz aber zumindest “”fast exponentiell’ïst: Für alle $\varepsilon > 0$ gilt die Abschätzung $H[f(t)] - H[f_\infty] \leq C_\varepsilon t^{-1/\varepsilon}$ $(t > 0)$ mit einer von ε abhängigen Konstanten $C_\varepsilon > 0$.

3 Eine Fokker-Planck-Gleichung und Entropie

Boltzmann hat das Konzept der Entropie vor über 100 Jahren begründet. Seitdem haben die damit verbundene Ideen Eingang in sehr verschiedenen Gebieten gefunden, etwa in der Informationstheorie, in der Theorie hyperbolischer Erhaltungsgleichungen sowie in Beweisen gewisser Funktionalungleichungen. Insbesondere mit ihrer Anwendung auf nichtlineare Diffusionsprozesse erreichte die Theorie der Entropiemethoden eine neue Qualität.

Als Illustration betrachten wir die homogene Boltzmann-Gleichung ohne äußere Kräfte mit dem Fokker-Planck-Operator $Q(f) = \mathrm{div}_v(\nabla_v f + vf)$ und schreiben die entsprechende lineare *Fokker-Planck-Gleichung* in der Form

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \mathrm{div}(\nabla u + xu) = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^d,\ t > 0, \quad u(x,0) = u_0(x).$$

Das Anfangsdatum u_0 sei nichtnegativ und eine Wahrscheinlichkeitsdichte, d.h. $\int_{\mathbb{R}^d} u_0(x)\,dx = 1$. Wie zuvor ist der – in der Menge der Wahrscheinlichkeitsdichten einzige – Gleichgewichtszustand u_∞ durch die (nun d-dimensionale) Maxwellverteilung $u_\infty(x) = (2\pi)^{-d/2} e^{-|x|^2/2}$ gegeben. Wiederum sind wir am Konvergenzverhalten der Lösung $u(t)$ gegen u_∞ interessiert.

Es ist zweckmäßig, anstelle der Boltzmannschen Entropie die relative Entropie

$$H_r[u] = \int_{\mathbb{R}^d} u \log u\,dx - \int_{\mathbb{R}^d} u_\infty \log u_\infty\,dx \geq 0 \tag{3}$$

zu verwenden. Das Funktional H_r erbt die strikte Konvexität der Boltzmann-Entropie und hat u_∞ als eindeutigen Minimierer, mit $H_r[u_\infty] = 0$. Eine Rechnung zeigt, dass die Funktion $t \mapsto H_r[u(t)]$ monoton fallend ist.

Das Ziel ist nun, die Entropieproduktion bzw. -dissipation

$$D[u(t)] = -\frac{dH_r[u(t)]}{dt} = 4\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla \sqrt{u(t;x)}|^2\,dx - 2d + \int_{\mathbb{R}^d} |x|^2 u(t;x)\,dx$$

nach unten durch die relative Entropie abzuschätzen. Gilt nämlich allgemein die Ungleichung $D[u] \geq \lambda H_r[u]$ mit einer Konstanten $\lambda > 0$, so folgt

$$\frac{dH_r[u(t)]}{dt} = -D[u(t)] \leq -\lambda H_r[u(t)], \quad t > 0, \tag{4}$$

woraus man mit dem Gronwallschen Lemma sofort die exponentielle Konvergenz von $H_r[u(t)]$ gegen null schließt. Die Beziehung zwischen der Entropie und der Entropieproduktion kann bewiesen werden, indem man auch die Entropieproduktion nach der Zeit differenziert und abschätzt. Eine längere Rechnung ergibt

$$\frac{dD[u(t)]}{dt} \leq -2D[u(t)], \quad t > 0.$$

Daraus folgt zum einen die exponentielle Konvergenz von $D[u(t)]$; zum anderen erhalten wir

$$\begin{aligned} D[u(t)] &= -\int_t^\infty \frac{dD[u(s)]}{ds}\,ds \geq 2\int_t^\infty D[u(s)]\,ds \\ &= -2\int_t^\infty \frac{dH_r[u(s)]}{ds}\,ds = 2H_r[u(t)]. \end{aligned}$$

Dies ist gerade (4) mit $\lambda = 2$. Mithilfe der Csiszár-Kullback-Ungleichung (2) folgt hieraus übrigens auch die exponentielle Konvergenz $u(t) \to u_\infty$ in der L^1-Norm.

Als Beiprodukt der obigen Rechnung erhalten wir einen Beweis für eine wichtige Funktionalungleichung, nämlich die *logarithmische Sobolev-Ungleichung* $H_r[u] \leq \frac{1}{2}D[u]$ oder

$$\int_{\mathbb{R}^d} u \log u\,dx + \log\left((2\pi e^2)^{d/2}\right) \leq 2\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla\sqrt{u}|^2\,dx, \tag{5}$$

die die relative Entropie H_r mit der sogenannten *Fisher-Information* [8]

$$F[u] = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla\sqrt{u}|^2\,dx$$

in Beziehung setzt. Die Ungleichung (5) wurde zuerst von Gross in den 1970er-Jahren bewiesen. Eine äquivalente Version wurde allerdings bereits von Stam Ende der 1950er-Jahre gezeigt. Der obige Beweis stammt im Wesentlichen von Bakry und Emery [2]. Die Ungleichung (5) zeigt, dass H^1-Funktionen $f = \sqrt{u}$ in den Orlicz-Raum $L^2 \log L^2(u_\infty dx)$ einbetten. Dies klingt zunächst nicht spektakulär, da die Sobolev-Ungleichungen z.B. die Einbettung in L^p mit $p = 2d/(d-2) > 2$ garantieren. Allerdings ist die Konstante in (5) im Gegensatz zu den Sobolev-Ungleichungen unabhängig von der Raumdimension d, was etwa von Bedeutung für die thermodynamischen Limites in der Mathematischen Physik ist.

Die betrachtete Fokker-Planck-Gleichung ist linear; prinzipiell kann also das exponentielle Abklingen der Lösungen auch durch eine Spektralanalysis des Differentialoperators erhalten werden. Die Entropiemethode ist jedoch vergleichsweise einfach und liefert einen expliziten Wert für die Abklingrate. Noch wichtiger ist allerdings, dass sich die Entropiemethode relativ problemlos auf eine Vielzahl *nichtlinearer* Gleichungen übertragen lässt.

4 Weitere Anwendungen

Langzeitverhalten von Lösungen und Funktionalungleichungen. Wir haben bereits zwei Anwendungen im vorigen Abschnitt kennengelernt: die Berechnung von Abklingraten für die Lösung der linearen Fokker-Planck-Gleichung und der Beweis einer logarithmischen Sobolev-Ungleichung. Der Entropie-Beweis für die Konvergenz der Lösung $u(t)$ einer diffusiven Evolutionsgleichung im Langzeitlimes kann allgemein grob in drei Schritte unterteilt werden.

Zunächst berechnet man bei gegebenem Funktional $H[u] \geq 0$ die Entropieproduktion $D = -dH/dt$. Im zweiten Schritt leitet man eine Funktionalungleichung zwischen der Entropie H und der Entropieproduktion D in der Form $D \geq \phi(H)$ her, wobei ϕ eine nichtnegative, monotone Funktion ist; dies ist der Kern des Beweises. Im dritten Schritt schließt man von der Ungleichung

$$\frac{dH[u(t)]}{dt} = -D[u(t)] \leq -\phi(H[u(t)]) \quad (t > 0)$$

auf das Abklingverhalten von $H[u(t)]$. Im Falle von $f(s) = \lambda s$ folgt exponentielle Konvergenz mit Rate $\lambda > 0$; falls $f(s) = \lambda s^\gamma$ mit $\gamma > 1$, erhält man algebraische Konvergenz mit Rate $1/(\gamma - 1)$.

Die im vorigen Abschnitt präsentierte Vorgehensweise überträgt sich fast wortgetreu von der linearen Fokker-Planck-Gleichung auf wesentlich allgemeinere Situationen. Beispielsweise können nichtlineare Fokker-Planck-Gleichungen mit sehr allgemeinen (nur hinreichend konvexen) Potentialen $V(x)$ und nichtlinearem Diffusionsverhalten behandelt werden:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(f(u) + u\nabla V) \quad \text{in } \mathbb{R}^d,\ t > 0, \quad u(x,0) = u_0(x).$$

Ist beispielsweise $f(u) = u^m$ mit einem Parameter $m > 1$, so folgt mit analogen Ideen (jedoch weit größerem technischen Aufwand) exponentielle Konvergenz von $u(t)$ gegen den eindeutigen Gleichgewichtszustand u_∞ in der L^1-Norm mit expliziter Rate [4].

Nicht nur die Evolutionsgleichungen, sondern auch das betrachtete Entropie-Funktional kann verallgemeinert werden. Ein relativ allgemeiner Ansatz ist $H_g[u]$

$= \int_{\mathbb{R}^d} g(u(x))\,dx$ mit einer konvexen Funktion g. Allerdings muss für jede Gleichung bestimmt werden, welche Funktionen g zu ihr passend sind in dem Sinne, dass $H_g[u(t)]$ sich entlang von Lösungen der Gleichung monoton verhält. In der Praxis haben sich vor allem die homogenen Funktionale

$$H_p(u) = \frac{1}{p(p-1)} \int_{\mathbb{R}^d} u^p\,dx \quad (p \neq 0,1) \tag{6}$$

bewährt. Sinn dieser Verallgemeinerung ist nicht nur der Beweis von Abklingraten in verschiedenen L^p-Normen, sondern auch der Beweis neuer Funktionalungleichungen. Angewandt auf die lineare Fokker-Planck-Gleichung führen die Entropien der Form H_p mit $p > 1$ auf die sogenannten *Beckner-Ungleichungen*

$$\frac{p}{p-1}\Big[\int_{\mathbb{R}^d} f(x)\,d\mu(x) - \Big(\int_{\mathbb{R}^d} f(x)^{1/p}\,d\mu(x)\Big)^p\Big] \leq C_p \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla\sqrt{f(x)}|^2\,d\mu(x),$$

wobei $f(x) = u(x)/u_\infty(x)$ die relative Dichte, $d\mu = u_\infty dx$ das invariante Maß und u_∞ wie zuvor die Maxwellverteilung sind. Zusätzlich lässt sich das Maß μ in weiten Grenzen variieren, indem man lineare Fokker-Planck-Gleichungen mit anderen Potentialen V betrachtet.

Schließlich wollen wir erwähnen, dass auch Entropien mit Ableitungen unter dem Integral verwendet werden, wie z.B.

$$D_\alpha(u) = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u^{q/2}|^2\,dx, \quad q \neq 0. \tag{7}$$

Insbesondere ist das Funktional D_1 die bereits erwähnte Fisher-Information. Kann die Monotonie von $D_2[u(t)]$ entlang beliebiger Lösungen $u(t)$ einer gegebenen Evolutionsgleichung bewiesen werden, so folgt sofort die zeituniforme H^1-Glattheit von $u(t)$.

Existenz und Positivität von Lösungen. Entropiemethoden können dazu verwendet werden, um die *Positivität* von Lösungen gewisser Differentialgleichungen, für die kein Maximumprinzip zur Verfügung steht, zu zeigen. Wir wollen dies anhand von zwei Beispielen illustrieren.

Die Lösung $u(t;x)$ der eindimensionalen *Dünnfilmgleichung*

$$\begin{aligned} &u_t + (|u|^\beta u_{xxx})_x = 0 \quad \text{in } (0,1),\ t > 0,\\ &u_x = |u|^\beta u_{xxx} = 0 \quad \text{an } x = 0,1, \quad u(x,0) = u_0(x) > 0, \end{aligned}$$

beschreibt die orts- und zeitabhängige Dicke eines Flüssigkeitsfilms auf einer glatten Oberfläche. Der Parameter $\beta > 0$ ist durch die hydrodynamischen Eigenschaften der jeweiligen Flüssigkeit festgelegt; typischerweise ist $1 \leq \beta \leq 3$. Die Indizes stellen hier partielle Ableitungen nach t bzw. x dar. Diese Gleichung ist in den letzten Jahren intensiv in der mathematischen Literatur analysiert worden, da sie eine Reihe interessanter Eigenschaften besitzt. Eine dieser Eigenschaften ist die Tatsache, dass im Falle $\beta > 2$ die Lösung für alle Zeiten positiv bleibt, wenn das Anfangsdatum u_0 positiv ist. Das bedeutet, dass der Flüssigkeitsfilm nicht reißt.

Da für Gleichungen höherer Ordnung im Allgemeinen kein Maximumprinzip zur Verfügung steht, muss die Positivität mit anderen Mitteln bewiesen werden. Es zeigt sich, dass dies für $\beta \geq 4$ mittels von Entropiemethoden möglich ist. Die beiden entscheidenden Entropien wurden dabei von Bernis und Friedman [3] identifiziert: die erste ist H_p von (6) mit $p = 2 - \beta$, die zweite ist D_q von (7) mit $q = 2$. Genau genommen nutzt der Beweis gar nicht die Monotonie dieser Größen, sondern nur ihre uniforme Beschränktheit in der Zeit. Die Beschränktheit von $D_2[u(t)]$ impliziert Hölder-Stetigkeit:

$$|u(t;x) - u(t;y)| \leq C|x-y|^{1/2},$$

wobei die Konstante $C > 0$ zeitunabhängig ist. Angenommen, $u(T)$ würde an einem Punkt x_0 verschwinden. Dann folgt mit der Hölder-Stetigkeit, dass

$$H_{2-\beta}[u(T)] = \int_0^1 u(T;x)^{2-\beta}\, dx \geq C \int_0^1 |x - x_0|^{1-\beta/2}\, dx.$$

Für $\beta \geq 4$ divergiert das letzte Integral; dies steht im Widerspruch zur zeituniformen Beschränktheit von $H_{2-\beta}[u(t)]$.

Als zweites Beispiel betrachten wir ein Kreuzdiffusionsmodell aus der Populationsdynamik, das 1979 von Shigesada, Kawasaki und Teramoto [12] vorgeschlagen wurde. Unter vereinfachenden Annahmen können wir das Modell wie folgt formulieren:

$$u_t = \Delta(a_1 u + uv), \quad v_t = \Delta(a_2 v + uv) \quad \text{in } \Omega,\ t > 0, \tag{8}$$

mit homogenen Neumann-Randbedingungen und Anfangsbedingungen $u(\cdot,0) = u_0 \geq 0$, $v(\cdot,0) = v_0 \geq 0$, wobei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein beschränktes Gebiet sei. Die Variablen u und v beschreiben die zeitliche Entwicklung zweier Populationsdichten, die miteinander konkurrieren, und a_1, $a_2 > 0$ sind zwei Diffusionskoeffizienten. Der Term uv modelliert die Segregation der beiden Spezies. Die Analysis dieses Systems ist nichttrivial, denn die Diffusionsmatrix ist im Allgemeinen nicht positiv definit (sogar nicht einmal symmetrisch). Auch für (8) steht kein Maximumprinzip zur Verfügung. Um die Nichtnegativität der Lösungen zu zeigen, führen wir neue Variablen $w = (y,z)$ über $u = e^y$ und $v = e^z$ ein. Können wir die Existenz von Lösungen in den Variablen y und z zeigen, so sind die Populationsdichten u und v automatisch positiv.

Verblüffenderweise ist die Diffusionsmatrix in w symmetrisch und positiv definit:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(w) = \operatorname{div}(A(w)\nabla w)$$

mit

$$\rho(w) = \begin{pmatrix} e^y \\ e^z \end{pmatrix}, \quad A(w) = \begin{pmatrix} a_1 e^y + e^{y+z} & e^{y+z} \\ e^{y+z} & a_2 e^z + e^{y+z} \end{pmatrix}.$$

Dies ist kein Zufall. Es zeigt sich nämlich, dass die Tatsache, dass das System *symmetrisierbar* ist (in dem Sinne, dass die neue Diffusionsmatrix symmetrisch und positiv definit ist), äquivalent zur Existenz einer Entropie ist. Die neuen Variablen sind dann gerade die Ableitungen der Entropiedichte h nach den alten Variablen: $y = \partial h/\partial u$ und $z = \partial h/\partial v$. In diesem Fall lautet die Entropie

$$H(u,v) = \int_\Omega h(u,v)\,dx \quad \text{mit Dichte } h(u,v) = u(\log u - 1) + v(\log v - 1).$$

Diese Zusammenhänge sind nicht neu: Die Äquivalenz zwischen der Symmetrisierbarkeit der Gleichungen und der Existenz einer Entropie ist bei hyperbolischen Erhaltungsgleichungen wohlbekannt [11]. Die Variablen y und z werden in der Thermodynamik Entropievariablen genannt. Neu ist die Anwendung dieser Prinzipien auf die Analysis parabolischer Systeme.[4]

5 Algorithmische Konstruktion von Entropien

In den Anwendungen der Entropiemethode sind gute Abschätzungen für die Entropiedissipation $D = -dH/dt$ von zentraler Bedeutung. Insbesondere ist von Interesse, ob die betrachtete Evolutionsgleichung ein gegebenes Funktional H dissipiert, also zumindest $D \geq 0$ gilt. Derartige Abschätzungen zu beweisen ist in vielen Fällen ein nichttriviales Unterfangen. Außerdem wird eine naive Herangehensweise in der Regel zu nicht-optimalen Abschätzungen führen. Wir wollen dies anhand eines einfaches Beispiels erläutern und daran anschließend eine Technik vorstellen, mit der Dissipationsungleichungen systematisch und algorithmisch abgeleitet werden können. Unsere Ausführungen basieren auf [9].

Wir betrachten wieder die eindimensionale Dünnfilmgleichung

$$u_t + (u^\beta u_{xxx})_x = 0, \quad x \in \mathbb{T},\ t > 0, \quad u(\cdot,0) = u_0 \geq 0,$$

wobei $\mathbb{T}$ der eindimensionale Torus sei, d.h. wir nehmen periodische Randbedingungen an. Wir setzen der Einfachheit halber voraus, dass eine glatte, positive Lösung existiert. Leiten wir das Funktional H_α in (6) ab, so folgt nach mehrfacher

[4] Beispielsweise in dieser Form verwendet in [6]. Das Populationsmodell wurde in [5] analysiert.

partieller Integration:

$$
\begin{aligned}
-\frac{H_\alpha}{dt} &= -\frac{1}{\alpha-1}\int_{\mathbb{T}} u^{\alpha-1}(u^\beta u_{xxx})_x\,dx = -\int_{\mathbb{T}} u^{\alpha+\beta-2}u_x u_{xxx}\,dx \\
&= (\alpha+\beta-2)\int_{\mathbb{R}} u^{\alpha+\beta-3}u_x^2 u_{xx}\,dx + \int_{\mathbb{T}} u^{\alpha+\beta-2}u_{xx}^2\,dx \\
&= -\frac{1}{3}(\alpha+\beta-2)(\alpha+\beta-3)\int_{\mathbb{R}} u^{\alpha+\beta-4}u_x^4\,dx + \int_{\mathbb{T}} u^{\alpha+\beta-2}u_{xx}^2\,dx.
\end{aligned} \tag{9}
$$

Die rechte Seite ist nichtnegativ, wenn $(\alpha+\beta-2)(\alpha+\beta-3)\leq 0$ oder $2\leq\alpha+\beta\leq 3$. Damit erhält man *eine* mögliche Antwort auf die Frage, für welche Parameter α das Funktional H_α bezüglich der Zeit monoton fällt. Die Antwort ist jedoch nicht optimal. Wir zeigen weiter unten, dass $dH_\alpha/dt\leq 0$ gilt, wenn $3/2\leq\alpha+\beta\leq 3$ erfüllt ist. Der Grund für die Nichtoptimalität der obigen Rechnung ist, dass der zweite Summand in (9) in einigen Fällen den ersten Summanden kompensiert, selbst wenn dessen Vorfaktor negativ ist.

Um zu zeigen, dass die Dissipation $D_\alpha = -dH_\alpha/dt$ auch für Parameter $3/2\leq\alpha+\beta\leq 3$ nichtnegativ ist, integrieren wir partiell auf folgende *systematische* Weise. Zunächst sei bemerkt, dass die partielle Integration in (9) in der Form $D_\alpha = D_\alpha + c\cdot I_1$ mit $c=1$ geschrieben werden kann, wobei

$$
\begin{aligned}
I_1 &= \int_{\mathbb{T}} u^{\alpha+\beta}u^{\alpha+\beta}\Big((\alpha+\beta-2)\Big(\frac{u_x}{u}\Big)^2\frac{u_{xx}}{u} + \Big(\frac{u_{xx}}{u}\Big)^2 + \frac{u_x}{u}\frac{u_{xxx}}{u}\Big)\,dx \\
&= \int_{\mathbb{T}} \Big(u^{\alpha+\beta}\frac{u_x}{u}\frac{u_{xx}}{u}\Big)_x\,dx = 0.
\end{aligned}
$$

Es gibt insgesamt drei (sinnvolle und unabhängige) Regeln für partielle Integrationen, nämlich

$$
\begin{aligned}
I_2 &= \int_{\mathbb{T}} u^{\alpha+\beta}\Big((\alpha+\beta-3)\Big(\frac{u_x}{u}\Big)^4 + 3\Big(\frac{u_x}{u}\Big)^2\frac{u_{xx}}{u}\Big)\,dx = \int_{\mathbb{T}}\Big(u^{\alpha+\beta}\Big(\frac{u_x}{u}\Big)^3\Big)_x\,dx = 0, \\
I_3 &= \int_{\mathbb{T}} u^{\alpha+\beta}\Big((\alpha+\beta-1)\frac{u_x}{u}\frac{u_{xxx}}{x} + \frac{u_{xxxx}}{u}\Big)\,dx = \int_{\mathbb{T}}\Big(u^{\alpha+\beta}\frac{u_{xxx}}{u}\Big)_x\,dx = 0.
\end{aligned}
$$

Das Problem, die Nichtnegativität von D_α zu zeigen, ist offensichtlich äquivalent zu: Finde reelle Zahlen c_1, c_2 und c_3, sodass

$$
D_\alpha = D_\alpha + c_1 I_1 + c_2 I_2 + c_3 I_3 \geq 0.
$$

Die Idee besteht nun darin, nicht die Summe der Integrale, sondern die Summe der *Integranden* abzuschätzen. Punktweise Nichtnegativität der Integranden impliziert trivialerweise Nichtnegativität des Integrals. Die Homogenität der auftretenden Ausdrücke erlaubt uns, die Integranden (bis auf den Faktor $u^{\alpha+\beta}$) als

Polynome zu interpretieren, indem wir die Ableitungen von u mit Polynomvariablen identifizieren: u_x/u mit ξ_1, u_{xx}/u mit ξ_2 usw. Setzen wir $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4)$, so entspricht

D_α dem Polynom $S(\xi) = -\xi_1\xi_3$,
I_1 dem Polynom $T_1(\xi) = (\alpha+\beta-2)\xi_1^2\xi_2 + \xi_2^2 + \xi_1\xi_3$,
I_2 dem Polynom $T_2(\xi) = (\alpha+\beta-3)\xi_1^4 + 3\xi_1^2\xi_2$,
I_3 dem Polynom $T_3(\xi) = (\alpha+\beta-1)\xi_1\xi_3 + \xi_4$.

Die Polyonome T_i nennen wir *Shift-Polynome*. Wenn wir das Problem

$$\exists c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{R} : \forall \xi \in \mathbb{R}^4 : (S + c_1T_1 + c_2T_2 + c_3T_3)(\xi) \geq 0 \tag{10}$$

lösen, verfügen wir über eine punktweise Abschätzung des Integranden, und es folgt $D_\alpha \geq 0$.
Meist ist man an stärkeren Resultaten interessiert: Man möchte die Entropiedissipation von unten durch ein nichtnegatives Integral abschätzen. Im Falle der Entropie für die Dünnfilmgleichung könnte man etwa beweisen wollen, dass

$$D_\alpha(u) \geq c \int_{\mathbb{R}} \left|(u^{(\alpha+\beta)/2})_{xx}\right|^2 dx$$

für ein geeignetes $c > 0$ gilt. Dies kann mit der oben beschriebenen Methode geschehen. Dazu wird der Integrand auf der rechten Seite durch ein Polynom P ausgedrückt, und das Problem (10) lautet nun:

$$\exists c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{R} : \forall \xi \in \mathbb{R}^4 : (S - cP + c_1T_1 + c_2T_2 + c_3T_3)(\xi) \geq 0. \tag{11}$$

Die obige Vorgehensweise übersetzt sich in den folgenden Algorithmus:

1. Berechne das Funktional $D_\alpha[u]$ und formuliere es als ein Polynom S. Dieses Polynom wird natürlich von der Gestalt der Gleichung abhängen.

2. Bestimme alle Shift-Polynome T_i, die partiellen Integrationen entsprechen. Diese Polynome hängen von der Ordnung und Homogenität der Differentialgleichung ab, aber nicht von deren spezieller Struktur.

3. Entscheide, für welche Parameter α das Problem (10) gelöst werden kann. Dies zeigt, dass H_α bezüglich t monoton fallend ist.

4. Entscheide, für welche Parameter α und Konstanten $c > 0$ das Problem (11) gelöst werden kann. Dies beweist Ungleichungen vom Typ $dH_\alpha/dt + cQ \leq 0$, wobei Q ein nichtnegatives Integral ist, das Ableitungen der Lösung enthält.

Die Hauptaufgabe besteht also darin, das algebraische Problem (10) bzw. (11) zu lösen. Interessanterweise handelt es sich hierbei um ein *Quantoreneliminationsproblem* aus der Reellen Algebraischen Geometrie. Tarski hat bereits 1951 gezeigt:

> Eine quantifizierte Aussage über Polynome kann immer auf algorithmischem Wege auf eine quantorenfreie Aussage reduziert werden.

Es existiert eine Vielzahl von implementierten Algorithmen zur Quantorenelimination, etwa das Paket QEPCAD (Quantifier Elimination using Partial Cylindrical Algebraic Decomposition) von Collins und Hong oder die Funktion "Reduce" von *Mathematica*. Diese Algorithmen liefern vollständige und exakte Lösungen. Der Nachteil ist die enorme Komplexität der verwendeten Algorithmen, die schon bei vergleichsweise einfachen Problemen jeden vernünftigen Zeitrahmen sprengen.

Ein alternativer Ansatz ist durch die Methode der Summe der Quadrate (SOS = Sum Of Squares) gegeben. Statt die Nichtnegativität in (10) bzw. (11) zu zeigen, wird das (scheinbar kompliziertere) Problem gelöst, das Polynom als Summe von Quadraten anderer Polynome zu schreiben. Diese Methode liefert in der Regel keine vollständigen Antworten, da es bekanntermaßen nichtnegative Polynome gibt, die nicht als eine Summe von Quadraten geschrieben werden können. Andererseits lässt sich die SOS-Methode wesentlich effizienter implementieren.

Das obige Problem für die eindimensionale Dünnfilmgleichung ist jedoch so einfach, dass wir das Entscheidungsproblem (10) '"per Hand'"lösen können. Offensichtlich ist die Benutzung der partiellen Integration I_3 nicht zielführend, da sie eine Ableitung vierter Ordnungen in erster Potenz enthält; wir setzen also $c_3 = 0$. Außerdem ist es zweckmäßig, den Ausdruck $\xi_1\xi_3$ in der Summe (11) zu eliminieren, da die Variable ξ_3 nur in erster Potenz auftritt; wir setzen entsprechend $c_2 = 1$. Die verbleibende quantifizierte Aussage lautet:

$$\begin{aligned}&\exists c_1 \in \mathbb{R} : \forall \xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3) \in \mathbb{R}^3 : \\ &(S + c_1 T_1 + T_2)(\xi) = (\alpha + \beta - 3)c_1 \xi_1^4 + (\alpha + \beta - 2 + 3c_1)\xi_1^2 \xi_2 + \xi_2^2 \geq 0.\end{aligned}$$

Das Polynom kann auf ein Polynom zweiten Grades in der Variablen ξ_1^2/ξ_2 zurückgeführt werden, und die Lösung der entsprechenden quadratischen Ungleichung ergibt die bekannte Bedingung $3/2 \leq \alpha + \beta \leq 3$. Abschätzungen für die Entropiedissipation können bewiesen werden, wenn $3/2 < \alpha + \beta < 3$, und in diesem Fall existiert eine (von α und β abhängige) Konstante $c > 0$ mit

$$\frac{dH_\alpha}{dt} + c \int_{\mathbb{T}} \left(\left| (u^{(\alpha+\beta)/2})_{xx} \right|^2 + \left| (u^{(\alpha+\beta)/4})_x \right|^2 \right) dx \leq 0.$$

Die obige Vorgehensweise verallgemeinert sich in natürlicher Weise bei Anwendung auf Gleichungen beliebiger gerader Ordnung k vom Typ

$$u_t = \left(u^{\beta+1} q\left(\frac{u_x}{u}, \ldots, \frac{u_{x\ldots x}}{u} \right) \right)_x, \quad t > 0, \tag{12}$$

wobei $u_{x\dots x}$ die Ableitung der Ordnung $k-1$ und q ein Polynom in $k-1$ Variablen darstellen. Im Falle der Dünnfilmgleichung ist $k=3$ und $q(\xi)=\xi_3$. Erstaunlich viele Gleichungen aus der Physik, Chemie und Biologie können in der Form (12) geschrieben werden. Neben der Dünnfilmgleichung ist ein weiteres Beispiel für eine (auch mathematisch interessante) Gleichung höherer Ordnung die *Derrida-Lebowitz-Speer-Spohn-Gleichung* (DLSS-Gleichung) [7]

$$u_t = (u(\log u)_{xx})_{xx} \quad \text{in } \mathbb{T},\ t>0,$$

die Interfacefluktuationen in einem zweidimensionalen Spinsystem, dem sogenannten (zeitdiskreten) Toom-Modell, beschreibt. Hier lautet das Polynom $q(\xi) = \xi_1^3 - 2\xi_1\xi_2 + \xi_3$. Es zeigt sich, dass sich die Funktionale H_α für $0 \le \alpha \le 3/2$ entlang von Lösungen monoton verhalten.

Kürzlich wurde die algorithmische Entropiekonstruktion auf eine Gleichung *sechster* Ordnung angewendet, um die Existenz von Lösungen zu zeigen [10]:

$$u_t - \left[u\left(\frac{1}{u}\big(u(\log u)_{xx}\big)_{xx} + \frac{1}{2}\big((\log u)_{xx}\big)^2\right)_x\right]_x = 0, \quad x\in\mathbb{T},\ t>0.$$

Die Variable $u(t;x)$ stellt die Elektronendichte in einem Halbleiter dar, der durch eine Variante eines Quantendiffusionsmodells beschrieben werden kann. Hier zeigt sich die Stärke der algorithmischen Technik: Der Beweis von apriori-Abschätzungen für diese Gleichung '"per Hand'ïst extrem mühsam. Die obige Methode führt einfach und elegant zum Ziel, da sie sämtliche möglichen partiellen Integrationen einbezieht.

Grundsätzlich kann die algorithmische Entropiekonstruktion auch für Gleichungen in mehreren Raumdimensionen d verwendet werden. Ein naiver Ansatz wäre, jeder partiellen Ableitung eine Polynomvariable zuzuordnen und sämtliche partiellen Integrationen als Shift-Polynome zu formulieren. Leider ergibt dies eine sehr hohe Anzahl von Variablen ξ_i und Koeffizienten c_j; das entstehende Problem ist auch algorithmisch nicht sinnvoll zu bewältigen. Eine bessere Variante ist, die Symmetrieeigenschaften der Gleichungen auszunutzen und nur mit den symmetrischen, skalaren Ausdrücken wie $|\nabla u|^2/u^2$ und $(\Delta u)/u$ zu arbeiten. Auf diese Weise kann beispielsweise gezeigt werden, dass H_α für $3/2 \le \alpha+\beta \le 3$ Lyapunov-Funktionale für Lösungen der mehrdimensionalen Dünnfilmgleichung sind. Im Falle der DLSS-Gleichung ist $H_\alpha(u(t))$ für alle $0<\alpha<2(d+1)/(d+2)$ monoton fallend.

Es ist zu erwarten, dass Entropiemethoden aufgrund ihrer physikalischen Interpretierbarkeit und ihrer Flexibilität in der Anwendung zunehmend an Bedeutung in der Analysis nichtlinearer partieller Diffusionsgleichungen gewinnen werden. Mit der Erweiterung der Techniken auf neue Gleichungsklassen werden Entropiemethoden bei der Validierung von Modellen und in der numerischen Analysis auch zukünftig eine wichtige Rolle spielen. Der Begriff der Entropie erweist sich damit mehr als ein Jahrhundert nach seiner Einführung als ein robustes und nützliches Instrument in Theorie und Anwendungen.

References

[1] L. Ambrosio, N. Gigli und G. Savaré. *Gradient flows in metric spaces and in the space of probability measures*. Birkhäuser, Basel, 2005.

[2] D. Bakry und M. Emery. Diffusions hypercontractives. In: Sém. Proba. XIX, no. 1123 in Lecture Notes in Math., pp. 177–206. Springer, 1985.

[3] F. Bernis und A. Friedman. Higher order nonlinear degenerate parabolic equations. *J. Differential Equations* 83 (1990), 179–206.

[4] J. A. Carrillo, A. Jüngel, P. Markowich, G. Toscani und A. Unterreiter. Entropy dissipation methods for degenerate parabolic problems and generalized Sobolev inequalities. *Monatsh. Math.* 133 (2001), 1–82.

[5] L. Chen and A. Jüngel. Analysis of a multi-dimensional parabolic population model with strong cross-diffusion. *SIAM J. Math. Anal.* 36 (2004), 301–322.

[6] P. Degond, S. Génieys, and A. Jüngel. A system of parabolic equations in nonequilibrium thermodynamics including thermal and electrical effects. *J. Math. Pures Appl.* 76 (1997), 991–1015.

[7] B. Derrida, J. Lebowitz, E. Speer und H. Spohn. Fluctuations of a stationary nonequilibrium interface. *Phys. Rev. Letters* 67 (1991), 165–168.

[8] R. Fisher. Theory of statistical estimation. *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc. 22* (1925), 700–725.

[9] A. Jüngel and D. Matthes. An algorithmic construction of entropies in higher-order nonlinear PDEs. *Nonlinearity* 19 (2006), 633–659.

[10] A. Jüngel and J.-P. Milišić. A sixth-order nonlinear parabolic equation for quantum systems. Submitted for publication, 2008.

[11] S. Kawashima and Y. Shizuta. On the normal form of the symmetric hyperbolic-parabolic systems associated with the conservation laws. *Tohoku Math. J., II. Ser.* 40 (1988), 449–464.

[12] N. Shigesada, K. Kawasaki und E. Teramoto. Spatial segregation of interacting species. *J. Theoret. Biol.* 79 (1979), 83–99.

[13] C. Villani. *Optimal Transport, Old and New*. To appear, Springer, 2009. Online: *http://www.umpa.ens-lyon.fr/∼cvillani/surveys.html*.

Ansgar Jüngel and Daniel Matthes
Institut für Analysis und Scientific Computing, TU Wien
Wiedner Hauptstr. 8–10, 1040 Wien