布朗运动的hitting time与拉普拉斯算符的本征态

拉普拉斯算符
数学话题下的优秀答主

布朗运动是一个连续时间随机过程。在19世纪，生物学家布朗用显微镜观察悬浮在水中的花粉颗粒，发现花粉颗粒在做无规则的游走。1905年爱因斯坦给出了布朗运动的一个数学描述。根据爱因斯坦的结果，花粉颗粒之所以会做无规则的游走，是因为它受到了水分子的随机撞击。爱因斯坦进一步推导得到，做布朗运动的微粒在时间 t 内游走的平均距离正比于 $\sqrt{t}$. 二十世纪初(1930年左右)的数学家们例如Levy, Wiener等对布朗运动做了进一步研究，并且给出了布朗运动的严格的数学定义。二十世纪的数学家们对布朗运动的研究产生了丰富的成果，其中最重要的当属伊藤清所开创的随机分析和随机微分方程。尽管严格研究布朗运动需要用随机分析和鞅理论，但是我们仍然可以用爱因斯坦的经典方法得出布朗运动的一些重要结论。这里我要用经典分析的方法解决这个问题：**假设有一个在 $\mathbb{R}^d$ 中做布朗运动的微粒， $t=0$ 时刻它从原点出发，在时刻 T 它首次击中了一个以原点为球心，半径为 R 的 $d-1$ 维超球面。显然，粒子击中球面的时刻 T 是一个依赖于球半径的随机变量。请问如何计算这个随机变量的概率密度?**

为了简单起见，我先考虑在二维空间中的布朗运动，然后将结果推广到任意高维。我们考虑这样的一个二维集合： $\Omega=\{(x,y):x^2+y^2\le a^2\}$. 记从 $(x,y)\in\Omega$ 出发的粒子首次击中圆 $\partial\Omega$ 的时刻为 $T_{x,y}$. 在每一步，粒子都以 $1/4$ 概率随机选取上下左右四个方向移动一步，每步的步长为 Δ ， 每移动一步所需要的时间为 δt . 我们可以得到概率 $p(T_{x,y}=t),t\ge 0$ 满足这样的递归关系：

$$\begin{aligned}p(T_{x,y}=t)&=\frac{1}{4}p(T_{x+\Delta,y}=t-\delta t)+\frac{1}{4}p(T_{x-\Delta,y}=t-\delta t)\\&+\frac{1}{4}p(T_{x,y+\Delta}=t-\delta t)+\frac{1}{4}p(T_{x,y-\Delta}=t-\delta t),\\&s.t.\,x^2+y^2<a^2,\forall t\ge 0\end{aligned}$$

定义 $T_{x,y}$ 的矩母函数为

$$f(x,y,s)=\mathbb{E}\left(e^{-sT_{x,y}}\right)=\int_0^\infty p(T_{x,y}=t)e^{-st}dt$$

根据概率的递归关系，我们可以很容易得到矩母函数的递归关系为：

$$f(x,y,s)=\frac{1}{4}e^{-s\delta t}\Big(f(x+\Delta,y,s)+f(x-\Delta,y,s)+f(x,y+\Delta,s)+f(x,y-\Delta,s)\Big)$$

将上面的式子对时间微元 δt 做和步长 Δ 做泰勒级数展开，消掉相同的项，忽略掉高阶无穷小，最终得到矩母函数应该满足这样的微分方程：

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)f(x,y,s)=\frac{4s\delta t}{\Delta^2}f(x,y,s)$$

为了求解这个方程，我们还需要边界条件。当 $x^2+y^2=a^2$ 时，我们有

$$p(T_{x,y}=t)=\delta(t)$$

于是就有矩母函数的边界条件为

$$f(x,y,s)\Big|_{x^2+y^2=a^2}=1$$

我们可以将上面的结果推广到任意维欧几里得空间 $\mathbb{R}^d$ 中。一个初始位置在闭集 $\Omega\subset\mathbb{R}^d$ 中的粒子，从 $t=0$ 时刻开始做布朗运动，在 T 时刻该粒子首次击中集合边界 $\partial\Omega$. 显然，首次击中时 T 是一个依赖于初始位置 $\boldsymbol{x}$ 的连续随机变量。首次击中时的概率密度为 $p(T_{\boldsymbol{x}}=t)$ ， $T_{\boldsymbol{x}}$ 的矩母函数为 $f(\boldsymbol{x},s)=\mathbb{E}\left(e^{-sT_{\boldsymbol{x}}}\right)$. 该矩母函数满足这样的微分方程：

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x},s)=\frac{2ds\delta t}{\Delta^2}f(\boldsymbol{x},s),s.t.\,f(\boldsymbol{x}\in\partial\Omega,s)=1$$

其中 Δ 为粒子运动的步长， δt 为每移动一步所需的时间， d 为空间的维度， $\nabla^2=\sum_{i=1}^d\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ 为 $\mathbb{R}^d$ 中的拉普拉斯算符。因此要求解hitting time的概率密度函数，我们就要计算拉普拉斯算符在闭集 Ω 上的本征态。我这里分别给出一维，二维和三维的结果。我还可以将结果推广到任意正整数维。

- **一维拉普拉斯算符的本征态**

此时方程简化为

$$\frac{d^2f(x,s)}{dx^2}=\frac{2s\delta t}{\Delta^2}f(x,s),s.t.\,f(x\in\{-a,a\},s)=1$$

求解得到

$$f(x,s)=\frac{\cosh(\sqrt{\lambda}x)}{\cosh(\sqrt{\lambda}a)},-a\le x\le a,\lambda=\frac{2s\delta t}{\Delta^2}$$

- **二维拉普拉斯算符的本征态**

我们采用极坐标，将方程表示为

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial f(r,\theta)}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 f(r,\theta)}{\partial\theta^2}=\frac{4s\delta t}{\Delta^2}f(r,\theta),s.t.\,f(r=a,\theta)=1.$$

求解得到

$$f(r,\theta)=R(r)$$

其中 $R(r)$ 满足这样的条件：

$$rR''(r)+R'(r)-\frac{4s\delta t}{\Delta^2}rR(r)=0,R(r=a)=1$$

满足这样条件的并且在原点处不发散的解为

$$R(r)=\frac{I_0(\sqrt{\lambda}r)}{I_0(\sqrt{\lambda}a)},\lambda=\frac{4s\delta t}{\Delta^2}$$

其中 $I_0(x)=\sum_{n=0}^\infty\frac{1}{n!\Gamma(n+1)}\left(\frac{x}{2}\right)^{2n}$ 为第一类虚宗量零阶贝塞尔函数。

- **三维拉普拉斯算符的本征态**

使用球坐标系，根据边界条件 $f(r=a,\theta,\phi,s)=1$ ，方程可以简化为

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)f(r,s)=\frac{6s\delta t}{\Delta^2}f(r,s)$$

令 $f(r,s)=\frac{R(r)}{\sqrt{r}}$ ，得到这样的带有边值问题的微分方程：

$$r^2R''(r)+rR'(r)-\left(\lambda r^2+\frac{1}{4}\right)R(r)=0,R(r=a)=\sqrt{a},\lambda=\frac{6s\delta t}{\Delta^2}$$

求解得到

$$f(r,s)=\sqrt{\frac{a}{r}}\frac{I_{1/2}(\sqrt{\lambda}r)}{I_{1/2}(\sqrt{\lambda}a)},\lambda=\frac{6s\delta t}{\Delta^2}$$

其中用到了 $1/2$ 阶虚宗量贝塞尔函数：

$$I_\alpha(x)=\sum_{m=0}^\infty\frac{1}{m!\Gamma(m+\alpha+1)}\left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\alpha}$$

当阶数为半奇数的时候，虚宗量贝塞尔函数有初等表示。这里我们有

$$I_{1/2}(x)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2}{x}\right)^{1/2}\sinh x$$

于是三维布朗运动的hitting time的矩母函数可以简化为

$$f(x,y,z,s)=\frac{a}{r}\frac{\sinh(\sqrt{\lambda}r)}{\sinh(\sqrt{\lambda}a)},r=\sqrt{x^2+y^2+z^2},\lambda=\frac{6s\delta t}{\Delta^2}$$

- **维数为任意正整数 $n\ge 3$ 时的拉普拉斯算符的本征态**

此时我仍然要解这个带有边界条件的拉普拉斯方程：

$$\begin{aligned}&\nabla^2 f(\boldsymbol{x},s)=\frac{2ns\delta t}{\Delta^2}f(\boldsymbol{x},s),s.t.\,f(\boldsymbol{x}\in\partial\Omega,s)=1,f(0,s)<\infty\\&,\text{where }\Omega=\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n:||\boldsymbol{x}||\le a\}\end{aligned}$$

此时拉普拉斯算符为

$$\nabla^2=\sum_{i=1}^n\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$$

根据边界条件，很容易看出来函数 $f(\boldsymbol{x},s)$ 只应该依赖于 $\boldsymbol{x}$ 的长度，也就是

$$f(\boldsymbol{x},s)=f(r,s),r=||\boldsymbol{x}||$$

因此方程的左边可以简化为

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x},s)=\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{n-1}{r}\frac{d}{dr}\right)f(r,s)$$

记 $\lambda=\frac{ns\delta t}{\Delta^2}$ ，原来的微分方程变为

$$\left(\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{n-1}{2r}\frac{d}{dr}\right)f(r,s)=\lambda f(r,s),f(r=a,s)=1,f(0,s)<\infty$$

令 $f(r)=g(r)r^{-n/2+1}$ ，我们有

$$\begin{aligned}&f'(r)=g'(r)r^{-n/2+1}+(-n/2+1)r^{-n/2}g(r)\\&f''(r)=g''(r)r^{-n/2+1}+g'(r)(-n+2)r^{-n/2}+(-n/2+1)(-n/2)r^{-n/2-1}g(r)\\&\frac{n-1}{r}f'(r)=(n-1)r^{-n/2}g'(r)+(n-1)(-n/2+1)r^{-n/2-1}g(r)\end{aligned}$$

于是原来的微分方程转化为

$$r^2g''(r)+rg'(r)-\left(2\lambda r^2+(n/2-1)^2\right)g(r)=0,g(a)=a^{n/2-1},\lim_{r\to 0}\frac{g(r)}{r^{n/2-1}}<\infty$$

求解边值问题得到

$$g(r)=\frac{a^{n/2-1}}{I_{n/2-1}(\sqrt{2\lambda}a)}I_{n/2-1}(\sqrt{2\lambda}r)$$

最终得到 $n\ge 3$ 时的首次击中时间概率分布的矩母函数为

$$\mathbb{E}(e^{-sT_{\boldsymbol{x}}})=f(r,s)=\frac{a^{n/2-1}}{r^{n/2-1}}\frac{I_{n/2-1}(\sqrt{2\lambda}r)}{I_{n/2-1}(\sqrt{2\lambda}a)},\lambda=\frac{ns\delta t}{\Delta^2}$$

编辑于 2020-06-14