

Key concepts:

- *Itô*扩散过程;
- 扩散算子;
- *Fokker-Planck*方程。

13.1 扩散过程

扩散是一种物理现象, 指任何物质 (如原子、离子、分子、能量) 从浓度较高的区域向浓度较低的区域净移动。例如, 颜料滴进水中, 在水里扩散开来的运动过程。扩散过程并没有统一的数学定义, 但其核心是轨道连续的马氏过程。

历史上, 研究扩散过程主要有两种方法:

1. 通过建立转移概率满足的方程来刻画其宏观性质的演化, 例如, 将墨水滴入水中, 墨水浓度在不同时刻和位置遵从的规律, 这是 Kolmogorov 的分析方法。
2. 利用追踪每个花粉粒子或墨水粒子的轨迹, 构造概率空间, 建立随机微分方程从微观角度描述其服从的运动规律, 这是 Itô 的随机分析方法。

经典扩散过程是随机过程中的内容, 可以参考: Pavliotis G A. Stochastic processes and applications[J]. Texts in applied mathematics, 2014, 60. Chapter 2. Diffusion Processes

本节课我们从随机分析角度, 研究扩散过程。

Definition 13.1 (Itô扩散过程) Itô 扩散过程为一个随机过程

$$X_t(\omega) = X(t, \omega) : [0, \infty) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$$

满足如下形式的随机微分方程

$$dX_t = b(t, X_t)dt + \sigma(t, X_t)dB_t, \quad t \geq s; \quad X_s = x$$

其中 B_t 为一个 m 维布朗运动, 并且 $b : [0, \infty) \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $\sigma : [0, \infty) \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$ 满足随机微分方程的强解存在唯一性条件:

(1) 存在常数 C , 使得

$$|b(t, x)| + |\sigma(t, x)| \leq C(1 + |x|), \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, t \in [0, T],$$

(2) 存在常数 K , 使得

$$|b(t, x) - b(t, y)| + |\sigma(t, x) - \sigma(t, y)| \leq K|x - y|, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n, t \in [0, T].$$

如果 b, σ 只依赖于 X_t , 并且满足

$$|b(x) - b(y)| + |\sigma(x) - \sigma(y)| \leq D|x - y|; \quad x, y \in \mathbb{R}^n,$$

我们称 X_t 为一个时齐的 Itô 扩散过程。

下面我们证明 Itô 扩散过程是一个 Markov 过程。

简单回忆 Markov 过程: 设 $\{X_t : t \in \mathcal{T}\}$ 为一个 $(\Omega, \mathcal{F}, (\mathcal{F}_t), P)$ 上 \mathcal{F}_t 适应过程, 状态空间为 (E, \mathcal{E}) , 称 X 为一个 Markov 过程, 如果对所有 E 上有界可测函数 f , $s < t \in \mathcal{T}$

$$\mathbb{E}[f(X_t) | \mathcal{F}_s] = \mathbb{E}[f(X_t) | X_s] \quad a.s.$$

Theorem 13.2 Itô 扩散过程是一个 Markov 过程。

Proof: 考虑 Itô 扩散过程的积分形式:

$$X_t = X_0 + \int_0^t b(u, X_u) du + \int_0^t \sigma(u, X_u) dB_u,$$

记 s 时刻从 x 位置出发的解为

$$X_t^{s,x} \triangleq x + \int_s^t b(u, X_u^{s,x}) du + \int_s^t \sigma(u, X_u^{s,x}) dB_u, \quad s < t.$$

$X_t^{s,x}$ 只与 $s, x, t, (B_u - B_s)_{s < u \leq t}$ 有关, 可以将 $X_t^{s,x}$ 看成 $s, x, t, (B_u - B_s)_{s < u \leq t}$ 的函数, 记为

$$G(s, x, t, (B_u - B_s)_{s < u \leq t})$$

另一方面, 由积分的线性性质,

$$X_t = X_0 + \int_0^s b(u, X_u) du + \int_0^s \sigma(u, X_u) dB_u + \int_s^t b(u, X_u) du + \int_s^t \sigma(u, X_u) dB_u.$$

由于解的唯一性,

$$\begin{aligned} X_t &= X_s + \int_s^t b(u, X_u) du + \int_s^t \sigma(u, X_u) dB_u \\ &= G(s, X_s, t, (B_u - B_s)_{s < u \leq t}) \end{aligned}$$

由布朗运动的增量独立性, $(B_u - B_s)_{s < u \leq t}$ 与 $\mathcal{F}_s \triangleq \sigma(B_v, v \leq s)$ 独立, 而且 $X_s \in \mathcal{F}_s$, 这意味着, 对于任意的有界可测函数 f

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[f(X_t) | \mathcal{F}_s] &= \mathbb{E}[f(G(s, X_s, t, (B_u - B_s)_{s < u \leq t})) | \mathcal{F}_s] \\ &= \mathbb{E}[f(G(s, x, t, (B_u - B_s)_{s < u \leq t})) |_{x=X_s}] \end{aligned}$$

那么有

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[f(X_t) | X_s] &= \mathbb{E}[\mathbb{E}[f(X_t) | \mathcal{F}_s] | X_s] \\ &= \mathbb{E}[\mathbb{E}[f(G(s, x, t, (B_u - B_s)_{s < u \leq t})) |_{x=X_s}] | X_s] \\ &= \mathbb{E}[f(G(s, x, t, (B_u - B_s)_{s < u \leq t})) |_{x=X_s}] \\ &= \mathbb{E}[f(G(s, X_s, t, (B_u - B_s)_{s < u \leq t})) | \mathcal{F}_s] \\ &= \mathbb{E}[f(X_t) | \mathcal{F}_s]. \end{aligned}$$

■

13.2 Markov半群理论

本节简要介绍Markov半群理论的相关内容。

回顾定义：对状态空间为 (E, \mathcal{E}) 的 Markov 过程 X_t ，定义：

$$(P_t f)(x) \triangleq \mathbb{E}[f(X_t)|X_0 = x] = \int f(y)p(t, x, y)dy.$$

其中

$$P_t : \mathcal{M}_b(E) \rightarrow \mathcal{M}_b(E), f \mapsto P_t f$$

为 $\mathcal{M}_b(E)$ 上的算子， $\mathcal{M}_b(E)$ 为 E 上所有有界可测函数的集合。那么由Kolmogorov-Chapman方程， P_t 满足半群(semigroup)性质

$$P_{t+s}f = P_t \circ P_s f.$$

称 P_t 为一个Markov半群。

设 P_t 为一个Markov半群，定义

$$\mathcal{L}f := \lim_{t \downarrow 0} \frac{P_t f - f}{t}.$$

我们称 \mathcal{L} 为 P_t 的无穷小生成元，简称生成元。

对于作用在有界连续函数半群 P_t ，我们可以定义它的伴随半群(Adjoint semigroup) P_t^* ，作用在概率测度上。

Definition 13.3 (伴随半群) 设 μ 为 X_0 的分布，定义算子：

$$(P_t^* \mu)(A) \triangleq \int P(X_t \in A | X_0 = x) d\mu(x) = \int p(t, x, A) d\mu(x).$$

那么 P_t^* 满足

$$\int (P_t f)(x) d\mu(x) = \int f(x) d(P_t^* \mu)(x)$$

我们称算子 P_t 和 P_t^* 是伴随的， P_t^* 为Markov半群 P_t 的伴随半群。记 $\mu_t \triangleq P_t^* \mu$ ，那么 μ_t 为Markov过程 X_t 的分布。

注. 设 T 为内积空间 H 上的算子，则 T 的伴随算子 T^* 是满足以下关系的唯一算子：

$$\langle T(x), y \rangle = \langle x, T^*(y) \rangle, \quad \forall x, y \in H,$$

把 $d\mu(x)$ 写成密度函数 $g(x)dx$ ，则 $d(P_t^* \mu)(x) = P_t^* g(x)dx$ ，伴随性质即为

$$\int P_t f(x) g(x) dx = \int f(x) P_t^* g(x) dx.$$

不变测度也称平稳分布，是Markov过程研究中的重要概念，下面在Markov半群语言下给出不变测度的概念。

Definition 13.4 (不变测度) 给定一个Markov半群 P_t ，我们称测度 π 是 P_t 不变的，如果对任意正有界可测函数 $f: E \rightarrow \mathbb{R}$ 以及任意 $t \geq 0$ ，有

$$\int_E P_t f d\pi = \int_E f d\pi.$$

或者等价地，

$$P_t^* \pi = \pi$$

13.3 扩散算子

经典扩散过程的研究一般先给出生成元，本节我们考虑扩散过程的生成元算子，一般称为扩散算子。

Definition 13.5 (扩散算子) 一个Markov扩散算子 (diffusion operator) \mathcal{L} 为一个如下形式的二阶微分算子

$$\begin{aligned} \mathcal{L}f &= \sum_i b_i(x) \frac{\partial}{\partial x_i} f + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Sigma_{ij}(x) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} f \\ &= b(x) \cdot \nabla f + \frac{1}{2} \text{Tr}(\Sigma(x)^T \nabla^2 f) \end{aligned} \quad (13.1)$$

其中 $\Sigma(x) = (\Sigma_{ij}(x))_{1 \leq i,j \leq n}$ 和 $b(x) = (b_i(x))_{1 \leq i \leq n}$ 分别为 x 的光滑 $n \times n$ 对称矩阵值和 \mathbb{R}^n 值函数。有时也记 $\Sigma: \nabla^2 f \triangleq \text{Tr}(\Sigma(x)^T \nabla^2 f)$ 为矩阵的Frobenius内积。

经典扩散过程由扩散算子 \mathcal{L} 构造， $b(x)$ 和 $\Sigma(x)$ 具有相应的含义，我们下面给出经典一维扩散过程的定义。

Definition 13.6 (经典一维扩散过程) 一个 \mathbb{R} 上转移函数为 $p(s, x; t, A)$ 的 Markov 过程 X_t 称为一个扩散过程，如果：

(1) (连续性Continuity). 对于任意 x 和 $\epsilon > 0$,

$$\lim_{t \rightarrow s \downarrow 0} \frac{1}{t-s} p(s, x; t, \{|X_t - x| > \epsilon\}) = 0.$$

(2) (漂移系数的定义). 存在函数 $b(s, x)$ 使得, 对于任意 x 和 $\epsilon > 0$,

$$\lim_{t \rightarrow s \downarrow 0} \frac{1}{t-s} \int_{|y-x| \leq \epsilon} (y-x) p(s, x; t, dy) = b(s, x).$$

(3) (扩散系数的定义). 存在函数 $\Sigma(x, s)$ 使得, 对于任意 x 和 $\epsilon > 0$,

$$\lim_{t \rightarrow s \downarrow 0} \frac{1}{t-s} \int_{|y-x| \leq \epsilon} (y-x)^2 p(s, x; t, dy) = \Sigma(x, s).$$

注. 在物理学上, 一阶矩主要描述动力学趋势, 二阶矩主要给出随机波动。

接下来我们看看Itô用SDE构造的Itô扩散过程和经典的是否一致, 也就是说我们下面的定理: 它说明了Itô扩散过程的生成元就是扩散算子(13.1)

Theorem 13.7 设 X_t 为一个生成元为 \mathcal{A} 的时齐Itô扩散过程

$$dX_t = b(X_t)dt + \sigma(X_t)dB_t$$

那么对于所有的二次连续可微函数 f , 有

$$\mathcal{A}f = \mathcal{L}f,$$

其中

$$\begin{aligned} \mathcal{L}f &= \sum_i b_i(x) \frac{\partial}{\partial x_i} f + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Sigma_{ij}(x) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} f \\ &= b(x) \cdot \nabla f + \frac{1}{2} \text{Tr}(\Sigma^T(x) \nabla^2 f), \end{aligned}$$

并且 $\Sigma_{ij}(x) = \sum_{k=1}^n \sigma_{ik}(x) \sigma_{kj}(x) = \sigma(x) \sigma^T(x)$.

Proof: 对 $f(X_t)$ 应用Ito公式,

$$\begin{aligned} df(X_t) &= \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} f(X_t) dX_t^i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} f(X_t) dX_t^i dX_t^j \\ &= \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} f(X_t) \sum_j \sigma_{ij}(X_t) dB_t^j + \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} f(X_t) b_i(X_t) dt + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Sigma_{ij}(X_t) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} f(X_t) dt \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[f(X_t)|X_0 = x] &= f(x) + \sum_{i,j} \mathbb{E} \left[\int_0^t \sigma_{ij}(X_s) \frac{\partial f(X_s)}{\partial x_i} dB_s^j \mid X_0 = x \right] \\
&\quad + \mathbb{E} \left[\int_0^t \left(\sum_i b_i(X_s) \frac{\partial f(X_s)}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Sigma_{i,j}(X_s) \frac{\partial^2 f(X_s)}{\partial x_i \partial x_j} \right) ds \mid X_0 = x \right] \\
&= f(x) + \mathbb{E} \left[\int_0^t \mathcal{L}f(X_s) ds \mid X_0 = x \right] + \sum_{i,j} \mathbb{E} \left[\int_0^t \sigma_{ij}(X_s) \frac{\partial f(X_s)}{\partial x_i} dB_s^j \mid X_0 = x \right]
\end{aligned}$$

由于对于有界可测函数 g , $\xi_t \triangleq \int_0^t g(X_s) dB_s$ 是鞅,

$$\mathbb{E} \left[\int_0^t g(X_s) dB_s \mid X_0 = x \right] = \xi_0 = \int_0^0 g(X_s) dB_s = 0$$

所以

$$\mathbb{E}[f(X_t)|X_0 = x] = f(x) + \mathbb{E} \left[\int_0^t \mathcal{L}f(X_s) ds \mid X_0 = x \right].$$

那么

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}f(x) &\triangleq \lim_{t \downarrow 0} \frac{\mathbb{E}[f(X_t)|X_0 = x] - f(x)}{t} \\
&= \lim_{t \downarrow 0} \frac{1}{t} \mathbb{E} \left[\int_0^t \mathcal{L}f(X_s) ds \mid X_0 = x \right] \\
&= \mathbb{E} \left[\lim_{t \downarrow 0} \frac{1}{t} \int_0^t \mathcal{L}f(X_s) ds \mid X_0 = x \right] \quad (\text{控制收敛定理}) \\
&= \mathbb{E} [\mathcal{L}f(X_0) \mid X_0 = x] \quad (*) \\
&= \mathcal{L}f(x)
\end{aligned}$$

为验证(*), 只需考虑对某个连续有界函数 h

$$\begin{aligned}
\left| \frac{1}{t} \int_0^t h(X_s) ds - h(X_0) \right| &= \frac{1}{t} \left| \int_0^t (h(X_s) - h(X_0)) ds \right| \\
&\leq \frac{1}{t} \int_0^t |h(X_s) - h(X_0)| ds.
\end{aligned}$$

由于 h 连续, 对任意 $\epsilon > 0$, 存在 δ , 使得 $0 < s < \delta$ 时

$$|h(X_s) - h(X_0)| < \epsilon$$

由于 $t \downarrow 0$, 此时,

$$\frac{1}{t} \int_0^t |h(X_s) - h(X_0)| ds < \frac{1}{t} \int_0^t \epsilon ds < \epsilon$$

■

注. 之后我们继续使用记号 \mathcal{L} 表示Itô 扩散过程 X_t 的生成元。记

$$u(t, x) \triangleq \mathbb{E}(f(X_t)|X_0 = x)$$

那么 $u(t, x)$ 满足Kolmogorov向后方程

$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t} = \mathcal{L}u(t, x) = b(x) \cdot \nabla u(t, x) + \frac{1}{2} \text{Tr}(\Sigma^T(x) \nabla^2 u(t, x)), \quad t > 0.$$

13.4 Fokker-Planck 方程

本节我们关注Itô扩散过程分布的演化，这是由Fokker-Planck方程描述的，Fokker-Planck方程本质就是Kolmogorov向前方程，我们将在证明中看到。

Theorem 13.8 (Fokker-Planck 方程) 设 X_t 为一个时齐 Itô扩散过程

$$dX_t = b(X_t)dt + \sigma(X_t)dB_t,$$

并且 $\mu_t(x) = \mu(x, t)$ 为 X_t 在 t 时刻的概率分布，且 $\mu_t(x)$ 关于 x 和 t 二次连续可微，设 $\mu(x)$ 为初始概率分布，那么 $\mu(x, t)$ 是下面方程的解

$$\partial_t \mu(x, t) = \mathcal{L}^* \mu(x, t) \quad (t > 0), \quad \mu(x, 0) = \mu(x),$$

其中算子

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^* g &\triangleq - \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} (b_j(x)g) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\Sigma_{ij}(x)g) \\ &= -\nabla \cdot (b(x)g) + \frac{1}{2} \nabla \cdot \nabla \cdot (\Sigma(x)g) \end{aligned}$$

为 \mathcal{L} 的伴随算子。

Proof: 我们先形式计算算子 \mathcal{L}^* 。由 \mathcal{L}^* 的伴随性，对内积 $\langle f, g \rangle := \int f g dx$ ，有

$$\langle \mathcal{L}f, g \rangle = \langle f, \mathcal{L}^*g \rangle$$

那么

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{L}f, g \rangle &= \int \left(b(x) \cdot \nabla f + \frac{1}{2} \text{Tr}(\Sigma^T(x) \nabla^2 f) \right) g(x) dx \\ &= \int \left(g(x) b(x) \cdot \nabla f + \frac{1}{2} g(x) \text{Tr}(\Sigma^T(x) \nabla^2 f) \right) dx \end{aligned}$$

下面我们分别计算

$$gb \cdot \nabla f, \quad gTr(\Sigma^T \nabla^2 f)$$

由散度乘积法则, 有

$$gb \cdot \nabla f = \nabla \cdot (fgb) - f \nabla \cdot (gb)$$

且

$$\begin{aligned} & gTr(\Sigma^T \nabla^2 f) \\ &= ((g\Sigma) \cdot \nabla) \cdot (\nabla f) \\ &= \nabla \cdot ((g\Sigma) \cdot (\nabla f)) - (\nabla f) \cdot \nabla \cdot (g\Sigma) \quad (*) \\ &= \nabla \cdot ((g\Sigma) \cdot (\nabla f)) - [\nabla \cdot (f \nabla \cdot (g\Sigma)) - f \nabla \cdot \nabla \cdot (g\Sigma)] \quad (\text{散度乘积法则}) \\ &= \nabla \cdot ((g\Sigma) \cdot (\nabla f)) - \nabla \cdot (f \nabla \cdot (g\Sigma)) + f \nabla \cdot \nabla \cdot (g\Sigma) \end{aligned}$$

其中 $n \times n$ 矩阵 A 和 n 维向量 \mathbf{v} 的数量积为

$$A \cdot \mathbf{v} \triangleq (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{v}, \dots, \mathbf{a}_n \cdot \mathbf{v}) = \left(\sum_{j=1}^n a_{1j} v_j, \dots, \sum_{j=1}^n a_{nj} v_j \right)$$

我们现在验证(*)式, 写成分量形式

$$\begin{aligned} ((g\Sigma) \cdot \nabla) \cdot (\nabla f) &= \sum_{i,j} g\Sigma_{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \\ \nabla \cdot ((g\Sigma) \cdot (\nabla f)) &= \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_j g\Sigma_{ij} \frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \\ (\nabla f) \cdot \nabla \cdot (g\Sigma) &= \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \left(\sum_j \frac{\partial g\Sigma_{ij}}{\partial x_j} \right) \end{aligned}$$

由于

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_j g\Sigma_{ij} \frac{\partial f}{\partial x_j} \right) = \sum_j \left(\frac{\partial g\Sigma_{ij}}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial x_i} + g\Sigma_{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right)$$

所以(*)式成立。回到

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{L}f, g \rangle &= \int (\nabla \cdot (fgb) - f \nabla \cdot (gb)) dx \\ &\quad + \frac{1}{2} \int (\nabla \cdot ((g\Sigma) \cdot (\nabla f)) - \nabla \cdot (f \nabla \cdot (g\Sigma)) + f \nabla \cdot \nabla \cdot (g\Sigma)) dx \\ &= \int f \left(-\nabla \cdot (bg) + \frac{1}{2} \nabla \cdot \nabla \cdot (\Sigma g) \right) dx \\ &\quad + \int \left(\nabla \cdot (fgb) + \frac{1}{2} \nabla \cdot (g\Sigma \cdot \nabla f) - \frac{1}{2} \nabla \cdot (f \nabla \cdot (g\Sigma)) \right) dx. \end{aligned}$$

由于 f 和 g 无穷远处为0(边界条件), 由散度定理:

$$\langle \mathcal{L}f, g \rangle = \int f \left(-\nabla \cdot (bg) + \frac{1}{2} \nabla \cdot \nabla \cdot (\Sigma g) \right) dx$$

即

$$\mathcal{L}^*g = -\nabla \cdot (bg) + \frac{1}{2} \nabla \cdot \nabla \cdot (\Sigma g)$$

回顾伴随半群的定义

$$(P_t^* \mu)(A) \triangleq \int P(X_t \in A | X_0 = x) d\mu(x) = \int p(t, x, A) d\mu(x).$$

满足

$$\mu_t(x) = \mu(x, t) = P_t^* \mu(x), \quad \int (P_t f)(x) d\mu(x) = \int f(x) d(P_t^* \mu)(x)$$

由Kolmogorov向前方程

$$\frac{\partial}{\partial t} P_t f = P_t \mathcal{L}f$$

有

$$\begin{aligned} \partial_t \int f dP_t^* \mu &= \partial_t \int P_t f d\mu = \int P_t \mathcal{L}f d\mu \\ &= \int \mathcal{L}f dP_t^* \mu = \int f d\mathcal{L}^* P_t^* \mu. \end{aligned}$$

这即是Fokker-Planck 方程

$$\partial_t \mu(x, t) = \mathcal{L}^* \mu(x, t).$$

■

注. 用Fokker-Planck 方程, 我们可以快速计算不变测度. 由不变测度的定义:

$$\int_E P_t f d\pi = \int_E f d\pi.$$

等价地,

$$P_t^* \pi = \pi$$

那么

$$\mathcal{L}^* \pi = 0$$

由此可以解得不变测度 π .