

Уравнения Колмогорова

В этой лекции мы посмотрим детальнее, как физика связана с диффузиями и уравнениями Колмогорова. Идеи из марковских цепей в силу марковских свойств диффузии пригодятся и здесь.

15.1 Обратное уравнение Колмогорова

Формально, до сих пор мы не выводили обратного уравнения Колмогорова, пользуясь вместо этого только некоторой интуицией о том, как связан макро- и микро-масштаб процесса диффузии. Кроме того, попытка сопоставить уравнение переноса и диффузию обернулась неожиданным результатом: на макроуровне плотность двигалась в одну сторону, а на микроуровне частицы двигались в другую, будто двигаясь обратно во времени.

Время привести физику в порядок.

Утверждение 15.1. Пусть дана диффузия X_t с генератором A . Тогда для $f \in \mathcal{D}_A$ условное матожидание

$$u(t, x) = \mathbb{E}[f(X_t) \mid X_0 = x]$$

удовлетворяет обратному уравнению Колмогорова

$$\partial_t u = Au$$

с краевым условием $u(0, x) = f(x)$. Более того, если $w(t, x)$ – некоторая $C^{1,2}$ функция, которая удовлетворяет уравнению с этим краевым условием, то она совпадает с

$$u(t, x) = \mathbb{E}[f(X_t) \mid X_0 = x].$$

▷ Мы выведем только само уравнение, но ещё немного технической работы с формулой Дынкина с подходящим временем остановки и можно получить утверждение о единственности.

Обозначим

$$u(t, x) = \mathbb{E}[f(X_t) \mid X_0 = x].$$

По формуле Дынкина

$$\mathbb{E}[f(X_{t+h}) \mid X_0 = x] = f(x) + \mathbb{E}\left[\int_0^{t+h} Af(X_s)ds \mid X_0 = x\right].$$

Поэтому $u(t, x)$ дифференцируема по t и

$$\partial_t u(t, x) = \mathbb{E}[Af(X_t) \mid X_0 = x]$$

Но это не всё, оператор A до сих пор внутри. С одной стороны, так как мы знаем, что u дифференцируема по времени, при $h \rightarrow 0$ получим, что

$$\frac{\mathbb{E}[f(X_{t+h}) \mid X_0 = x] - \mathbb{E}[f(X_t) \mid X_0 = x]}{h} = \frac{u(t+h, x) - u(t, x)}{h} \rightarrow \partial_t u(t, x).$$

С другой стороны, по определению генератора, если мы его применим по x игнорируя t , то получим

$$\begin{aligned} Au &= \lim_{h \rightarrow 0+} \frac{\mathbb{E}[u(t, X_h) \mid X_0 = x] - u(t, x)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0+} \frac{\mathbb{E}[\mathbb{E}[f(X_{t+h}) \mid X_h] \mid X_0 = x] - u(t, x)}{h} = \\ &= \lim_{h \rightarrow 0+} \frac{\mathbb{E}[f(X_{t+h}) \mid X_0 = x] - \mathbb{E}[f(X_t) \mid X_0 = x]}{h}. \end{aligned}$$

Это совпадает с тем, что выше; таким образом, как мы и хотели,

$$\partial_t u = Au, \quad u(0, x) = f(x).$$

□

Можно заметить, что из-за однородности по времени если взять от функции

$$q(t, x) = \mathbb{E}[f(X_T) \mid X_t = x] = \mathbb{E}[f(X_{T-t}) \mid X_0 = x] = u(T-t, x)$$

производную по времени, то получится

$$\partial_t q = -\partial_t u(T-t, x) = -Au(T-t, x)$$

или по-другому опять уравнение Колмогорова

$$\partial_t u(T-t, x) = Au(T-t, x),$$

но с другим краевым условием $u(T, x) = q(0, x) = f(x)$. То есть, его можно рассматривать обратно во времени, отсюда название *обратного уравнения*. Но в матожиданиях это не так заметно, чтобы понять реальный мотив, нам нужно задуматься о том, как меняется распределение X_t .

15.2 Новые переходные вероятности

Мы обошли вопрос о том, как меняются сами распределения X_t . Чтобы это лучше понять, нам пригодится знание об условных распределениях. Поскольку мы сейчас находимся в случае общих Марковских процессов, а не Марковских цепей, техника усложняется, но аналогия сохраняется.

Определение 15.1. Пусть (Ω, \mathcal{F}) и (Ξ, \mathcal{G}) – измеримые пространства. Переходным Марковским ядром называется отображение

$$P : \Xi \times \mathcal{F} \rightarrow [0, 1],$$

которое

1. является вероятностной мерой при фиксированном $x \in \Xi$, то есть, когда считаем $P(x, \cdot)$;
2. является измеримой функцией (случайной величиной) при фиксированном $A \in \mathcal{F}$, то есть, когда считаем $P(\cdot, A)$.

Мы уже встречали случайные меры в процессах Леви, это за исключением мелких технических моментов практически то же самое. Переходное ядро в самом общем виде описывает для цепи Маркова вероятности получить в следующем моменте времени значения процесса $X_{t+1} \in A$ при условии, что $X_0 = x$. По этой причине и записаны 2 пункта выше. Поскольку, в непрерывном времени не очень понятно, что значит в следующий момент, одного ядра не всегда достаточно.

Пример 15.1. Помните однородные по времени цепи Маркова с конечным числом состояний? Их можно задать, задав одно переходное ядро с помощью переходной матрицы как

$$P(x, X_{t+1}^{-1}(\{y\})) = P(X_{t+1} = y \mid X_t = x).$$

Интеграл по такому ядру – это интеграл по дискретной мере, то есть, просто сумма. Все формулы для вероятностей в цепи Маркова, которые мы видели до этого остаются верны.

Пример 15.2. Пуассоновский процесс X_t с интенсивностью λ – это общая цепь Маркова, в которой состояния дискретны, но время уже непрерывно. Мы можем вспомнить, что количество прыжков в среднем растёт с ростом временного горизонта, поэтому одного ядра нам будет недостаточно – нужно своё для каждого интервала $h > 0$.

$$P(X_{t+h} = y \mid X_t = x) = P_h(x, X_{t+h}^{-1}(\{y\})) = \begin{cases} \frac{(\lambda h)^{y-x}}{(y-x)!} e^{-\lambda h}, & y \geq x, \\ 0, & y < x. \end{cases}$$

Как мера, ядро формально запишется так:

$$P_h(x, A) = \left(\sum_{y \geq x} \frac{(\lambda h)^{y-x}}{(y-x)!} e^{-\lambda h} \delta_{y-x} \right) (A),$$

где δ_p понимается как дельта-мера, то есть, определяемая как

$$\delta_p(A) = \begin{cases} 1, & p \in A, \\ 0, & p \notin A. \end{cases}$$

Пример 15.3. Для однородных диффузий получается сложнее, но с той же мыслью. Для Винеровского процесса, например,

$$\mathbb{P}(W_{t+h} \in A \mid W_t = x) = P_h(x, W_{t+h}^{-1}(A)) = \int_A \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} e^{-(y-x)^2/(2h)} dy.$$

В этом случае в литературе часто можно встретить более краткую запись сразу для ядра

$$P_h(x, dy) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} e^{-(y-x)^2/(2h)} dy$$

и

$$\int_A P_h(x, dy),$$

чтобы подчеркнуть, что интегрирование происходит по y .

Для однородных диффузий в силу Марковского свойства тоже определены вероятности

$$\mathbb{P}(X_t \in A \mid X_0 = x),$$

которые можно также записать с помощью переходного ядра – оно всегда существует, так как эта условная вероятность по своей сути мера по A . И как условная вероятность, она также является измеримой функцией условия, то есть, x . Так, мы можем также записать в другом виде:

$$\mathbb{P}(X_{t+h} \in A \mid X_t = x) = \int_A dP_h(y, x)$$

или более кратко, как часто пишут,

$$\mathbb{P}(X_{t+h} \in A \mid X_t = x) = \int_A P_h(dy, x).$$

где для промежутка времени h мы определили ядро P_h .

Для случая $h = 0$ говорят, что $P_0(x, \cdot)$ – это дельта-мера δ_x .

Почему же уравнение Колмогорова, которое мы раньше записывали называется обратным? Рассмотрим случай, когда ядро задаётся переходной плотностью, которая дважды непрерывно дифференцируема по условию x и один раз дифференцируема по времени s :

$$P_h(x, dy) = p(y, t|x, s)dy, \quad t > s.$$

Далее если записывается интеграл без пределов, подразумевается, что он берётся по всему пространству.

Утверждение 15.2. Переходная плотность $p(y, T|x, T-s) = u(T-s, x)$ удовлетворяет по переменным x, s уравнению

$$\partial_s u = A_x u$$

с генератором A , применённым по x , и краевым условием $u(T, y) = \delta_x$

▷ Если записать матожидание как интеграл по плотности, то получим для $f \in C^2$, что из-за однородности по времени

$$\mathbb{E}[f(X_T) \mid X_{T-s} = x] = \mathbb{E}[f(X_s) \mid X_0 = x] = \int f(y)p(y, s|x, 0)dy.$$

Обратное уравнения Колмогорова для

$$\partial_s \mathbb{E}[f(X_s) \mid X_0 = x] = \int f(y)\partial_s p(y, s|x, 0)dy,$$

матожидания посередине, говорит, что

$$\partial_s \mathbb{E}[f(X_s) \mid X_0 = x] = A_x \mathbb{E}[f(X_s) \mid X_0 = x] = \int f(y)A_x p(y, s|x, 0)dy.$$

Мы пользуемся наличием плотности и требованиями гладкости, чтобы занести дифференцирования под интеграл. Таким образом,

$$\int_A f(y) (\partial_s p(y, s|x, 0) - A_x p(y, s|x, 0)) dy = 0.$$

Поскольку мы взяли произвольную f ,

$$\partial_s p(y, s|x, 0) - A_x p(y, s|x, 0) = 0$$

Или в другой форме с использованием однородности по времени

$$\partial_s p(y, T|x, T-s) - A_x p(y, T|x, T-s) = 0.$$

При $s = T$ по нашему определению переходного ядра

$$P_0(x, \cdot) = \delta_x,$$

поэтому краевое условие гарантировано. \square

Видно, что на самом деле, в силу граничного условия обратное уравнение Колмогорова нужно понимать как по-настоящему *обратное во времени*, поэтому в уравнении переноса ранее мы получили, что частицы летят в обратном направлении.

15.3 Прямое уравнение Колмогорова

Теперь мы знаем, как меняется плотность обратно во времени, но оказывается, мы можем получить и прямое уравнение. В физике его принято называть уравнением Фоккера-Планка, а в математике прямым уравнением Колмогорова или уравнением Фоккера-Планка-Колмогорова.

Теорема 15.3. (Уравнение Фоккера-Планка) Для плотности $p(y, t)$ сечения X_t , дважды дифференцируемой по аргументу y и дифференцируемой по t верно уравнение

$$\partial_t p = A_y^* p$$

с генератором, сопряжённым A и применённым к y , а также с краевым условием $p(y, 0) = p_0(y)$.

▷

Рассмотрим при $T > t$ матожидание

$$u(t, x) = \mathbb{E}[f(X_t) \mid X_0 = x]$$

и матожидание

$$q(t, x) = \mathbb{E}[f(X_T) \mid X_t = x] = \int f(y)p(y, T|x, t)dy.$$

Заметим, что

$$\mathbb{E}[q(t, X_t)] = \int q(t, y)p(y, t)dy = \mathbb{E}[f(X_T)]$$

не зависит от t , то есть, его производная по t равна нулю. Пользуясь тем, что можно заносить производную под знак интеграла, получаем, что

$$0 = \int \partial_t(qp)dy = \int (\partial_t qp + q\partial_t p)dy = \int (-A_y[q]p + q\partial_t p)dy,$$

где в конце мы вспомнили про обратное уравнение Колмогорова и

$$\partial_t q(t, y) = \partial_t \mathbb{E}[f(X_T) \mid X_t = y] = \partial_t \mathbb{E}[f(X_{T-t}) \mid X_0 = y] = -A_x u(T-t, y) = -A_y q(t, y).$$

Сопряжение получится, когда мы сделаем интегрирование по частям, предположив, что $u(q, x)$ по x убывает к нулю на бесконечности, это зависит от функции f . Конкретнее,

$$\int A_y[u]p(t, y)dx = \int uA_x^*[p]dy,$$

откуда в силу произвольности f (и соответственно u) получаем

$$\partial_t p - A_y^* p = 0.$$

□

Из этого уравнения также следует прямое уравнение Колмогорова, которое немного отличается краевым условием.

Следствие 15.4. Для переходной плотности $p(y, t|x, 0)$, дважды дифференцируемой по аргументу y и дифференцируемой по t верно уравнение

$$\partial_t p = A_y^* p$$

с генератором, сопряжённым A и применённым к y , а также с краевым условием $p(y, 0|x, 0) = \delta_x$.

На самом деле, уравнения верны не только для таких гладких функций, но и даже для некоторых обобщённых функций, а значит, для более общих вероятностных распределений. Поэтому условие про C^2 не является ограничивающим плюс отдельная большая теория уравнений частных производных и уравнений Фоккера-Планка в частности позволяют судить о существовании и единственности решений в конкретных случаях [24].

Пример 15.4. Уравнение диффузии

$$\partial_t u = \frac{1}{2} \partial_{xx}^2 u, \quad u : \mathbb{R}_{\geq 0} \times \mathbb{R}$$

является и прямым, и обратным уравнением Колмогорова для Винеровского процесса W_t , так как генератор

$$A = \frac{1}{2} \partial_{xx}^2$$

самосопряжённый.

Пример 15.5. Уравнение переноса

$$\partial_t u + \partial_x u = 0, \quad u : \mathbb{R}_{\geq 0} \times \mathbb{R}$$

является прямым для диффузии

$$dX_t = -dt$$

и обратным для

$$dY_t = dt,$$

так как для $A = \partial_x$ сопряжённым оператором будет $A^* = -\partial_x$.

Есть формула для сопряжённого оператора генератора, которую можно получить, сделав несколько раз интегрирование по частям.

Утверждение 15.5. Для диффузии

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

генератор определяется как

$$Af = \nabla f b + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sigma_{ij} (\nabla^2 f)_{ij},$$

а сопряжённый ему как

$$A^* f = -\operatorname{div}(b(x)f(x)) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \partial_{x_i x_j}^2 ((\sigma \sigma^T)_{ij} f).$$

15.4 Стационарные распределения и эргодичность

Уравнение Фоккера-Планка задаёт в каком-то смысле поток материи или вероятности. Оно показывает, куда и как должна смещаться плотность. С помощью уравнения Фоккера-Планка можно пытаться искать стационарные распределения Марковских процессов, а также доказывать сходимость к ним.

Определение 15.2. Распределение (плотность) μ называется стационарной при заданных граничных условиях, если

$$\int_A P_t(x, A) d\mu(x) = \mu(A).$$

Уравнение Фоккера-Планка позволяет посмотреть на стационарность с другой стороны: стационарная плотность не должна меняться со временем, значит, удовлетворяет

$$A^*\mu = 0,$$

причём на месте μ необязательно может быть именно плотность, возможно искать более общие решения.

Пример 15.6. В динамике Ланжевена

$$dX_t = (\nabla \ln p)(X_t)dt + dW_t$$

стационарная плотность определяется с помощью уравнения Фоккера-Планка. Для этого нужно записать условие стационарности

$$A_x^*v(t, x) = 0.$$

Зная формулу для сопряжённого

$$A^*f = -\operatorname{div}((\nabla \ln p)f(x)) + \frac{\sigma^2}{2}\Delta f,$$

можно получить с точностью до констант C

$$C - \sum_{i=1}^d \partial_{x_i} \ln p v(t, x) + \frac{\sigma^2}{2} \sum_{i=1}^d \partial_{x_i} v(t, x) = 0.$$

Тут можно заметить закономерность, если посмотреть на отдельные слагаемые:

$$\partial_{x_i} v(t, x) = v(t, x) \partial_{x_i} \ln p.$$

Это наводит на мысль, что решение нужно искать в форме

$$v(t, x) = C_0 e^{(2/\sigma^2) \ln p} + \sum_{i=1}^d c_i x_i,$$

но константы c_i обнулятся (иначе не получится условие нормировки), а константа C_0 – это нормировочная константа. Если дополнительно сделать $\sigma = \sqrt{2}$, то получится вообще

$$v(t, x) = C_0 p(x).$$

Более того, можно показать, что динамика Ланжевена действительно сходится (в разных метриках) к этому инвариантному распределению при соблюдении некоторых технических условий, среди которых, например, лог-вогнутость функции плотности или похожие условия. В дискретном времени (при использовании метода Эйлера) сходимость медленнее. На этой идее основаны методы семплирования ULA, MALA и их разные модификации из области MCMC.

- [14] M. G. Kendall and A. Bradford Hill. The analysis of economic time-series-part i: Prices. *Journal of the Royal Statistical Society. Series A (General)*, 116(1):11–34, 1953.
- [15] Robert C. Merton. Option pricing when underlying stock returns are discontinuous. *Journal of Financial Economics*, 3(1):125–144, 1976.
- [16] Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller, and Edward Teller. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, 06 1953.
- [17] Bernt Oksendal. *Stochastic Differential Equations (3rd Ed.): An Introduction with Applications*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1992.
- [18] Paul A. Samuelson. Proof that properly discounted present values of assets vibrate randomly. *The Bell Journal of Economics and Management Science*, 4(2):369–374, 1973.
- [19] O. A. Stepanov. Kalman filtering: Past and present. an outlook from russia. (on the occasion of the 80th birthday of rudolf emil kalman). *Gyroscopy and Navigation*, 2(2):99–110, Apr 2011.
- [20] R. L. Stratonovich. Conditional markov processes. *Theory of Probability & Its Applications*, 5(2):156–178, 1960.
- [21] Holbrook Working. A random-difference series for use in the analysis of time series. *Journal of the American Statistical Association*, 29(185):11–24, 1934.
- [22] L.E. Zachrisson. On optimal smoothing of continuous time kalman processes. *Information Sciences*, 1(2):143–172, 1969.
- [23] Guangyao Zhou. Metropolis augmented hamiltonian monte carlo. In *Fourth Symposium on Advances in Approximate Bayesian Inference*, 2022.
- [24] Н. В. Рекнер М. Шапошников С. В. Богачев, В. И. Крылов. *Уравнения Фоккера – Планка – Колмогорова*. Институт компьютерных исследований, 2013.
- [25] Ширяев А.Н. Булинский А.В. *Теория случайных процессов*. М:ФИЗМАТЛИТ, 2005.
- [26] Тиморин В.А. *Геометрия гамильтоновых систем и уравнений с частными производными*. Москва : ВШЭ, 2017.
- [27] Синай Я.Г. Коралов Л.Б. *Теория вероятностей и случайные процессы*. МЦНМО, 2013.
- [28] Р.Л. Стратонович. *Условные марковские процессы и их применение к теории оптимального управления*. Московский государственный университет, 1966.
- [29] А.Н. Ширяев. *Основы стохастической финансовой математики*. МЦНМО, 2016.