随机过程视角下的热方程与路径积分

陈轶钊

2025 年 3 月 13 日

目录

虽然热方程通常会被视作一个确定性的偏微分方程，但一些随机过程的工具也可以用于研究热方程。这一节主要的目的是展示布朗运动和最简单的热方程之间的联系，并且基于此给出路径积分的一个直觉上的推导。对一般的热方程，Feynman-Kac 公式给出了类似的结果（这也需要使用随机过程的工具证明）。

1 布朗运动

我们先解释何为布朗运动。一般而言，布朗运动会被解释为在有限时间里进行无穷多次随机游走后得到的“极限”。不过我们这里不深究“极限”的含义，而是直接给出定义：

定义 1.1 (布朗运动 (Brownian motion)) 一个布朗运动是指一族（取值在 $\mathbb{R}^d$ 中的）随机变量 $\{W_t\}_{t\in[0,+\infty)}$，且满足：

(1) $W_0 = 0$.

(2) 对任意的 $0 \le s < t < +\infty$，$W_t - W_s$ 的分量独立同分布，且均服从均值为 0，方差为 $(t-s)\cdot\sigma^2$ 的正态分布。其中 σ 是不依赖 s,t 的常数。

(3) 对任意的 $0 \le t_1 < t_2 < \cdots < t_n < +\infty$，随机变量 $W_{t_n} - W_{t_{n-1}}, W_{t_{n-1}} - W_{t_{n-2}}, \ldots, W_{t_2} - W_{t_1}$ 两两独立。

我们对上面的要求稍作解释。我们要求布朗运动的起点一定是原点，也就是第一个条件；而从时间 s 到时间 t 的运动可以看成经历了无穷多次随机游走，每次随机游走可以表示为 $W_{s+\Delta t} \approx W_s + \Delta x \cdot (2X-1)$（其中 X 服从二项分布），因此布朗运动作为随机游走的"极限"，我们希望它的分布是二项分布的和的极限，也就是正态分布（根据中心极限定理），这也就是第二个条件；最后，因为随机游走不依赖经过的时间，也不依赖过去的路径，所以我们要求布朗运动也具有类似的性质，也就是第三个条件。

单从布朗运动的定义来看，我们很难看出布朗运动是否存在。事实上，通过先构造在 $t = \frac{k}{2^l}$ 处的随机变量，再做连续延拓可以构造出布朗运动。不过这一节里我们略去这一部分论证，直接假定布朗运动是存在的。

我们有多种从布朗运动得到热方程的办法，这里我们展示两种办法。一种是，做布朗运动的粒子的密度分布服从热方程；另一种办法是，布朗运动的特定条件期望恰好给出热方程的解。我们会看到，后面一种办法恰好可以被解释为路径积分。

在下面的内容里，我们始终假定我们讨论的是标准布朗运动，也就是它的方差 σ 为 1.

2 由布朗运动给出的密度分布

我们假设空间 $\mathbb{R}^d$ 中有一个做布朗运动的粒子，但它的初始位置是随机的。这时候，这个粒子的运动可以用随机变量 $X_t = X_0 + W_t$ 来描述，其中 X_0 是初始的位置分布。我们下面形式地推导 X_t 的概率密度 $\rho(t,x)$ 应该满足的方程。这里我们不加证明地使用下列的伊藤引理 (Itô's lemma)：

引理 2.1 (伊藤引理 (Itô's lemma)) 设 X_t 由关系

$$\mathrm{d}X_t = b(t,\omega)\mathrm{d}t + \sigma(t,\omega)\mathrm{d}W_t$$

定义，其中 $\omega \in \Omega$ 是概率空间中的元素，$W_t = (W_t^{(1)}, W_t^{(2)}, \ldots, W_t^{(d)})$ 是布朗运动. 那么对二阶连续可微函数 $g(t,x)$，有

$$\mathrm{d}g(t,X_t) = \frac{\partial g}{\partial t}(t,X_t)\mathrm{d}t + \frac{\partial g}{\partial x}(t,X_t)\cdot \mathrm{d}X_t + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 g}{\partial x^2}(t,X_t)(\mathrm{d}X_t)^2,$$

其中 $(\mathrm{d}X_t)^2$ 按照下面的规则计算：

$$\mathrm{d}t\cdot\mathrm{d}t=\mathrm{d}t\cdot\mathrm{d}W_t^{(i)}=\mathrm{d}W_t^{(i)}\cdot\mathrm{d}t=0,\quad \mathrm{d}W_t^{(i)}\cdot\mathrm{d}W_t^{(j)}=\delta_{ij}\mathrm{d}t.$$

虽然上面的表达式都写成了微分的形式，但实际上每个表达式的含义都是指两边的伊藤积分相等。

此外我们还需要的是，伊藤积分 $\int_a^b f\mathrm{d}W_t$ 的期望一定是 0.

我们来看我们需要计算的密度分布 $\rho(t,x)$. 我们假设初始时刻的密度分布为 $\rho_0(x)$. 这时候随机过程 X_t 由

$$\mathrm{d}X_t=\mathrm{d}W_t$$

给出。任取一个二阶可微（且紧支）的函数 $g(x)$，根据伊藤引理，有：

$$\begin{aligned}\mathrm{d}g(X_s)&=\frac{\partial g}{\partial x^k}(X_s)\mathrm{d}W_s^{(k)}+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 g}{\partial x^i\partial x^j}(X_s)\mathrm{d}W_s^{(i)}\cdot\mathrm{d}W_s^{(j)}\\&=\frac{1}{2}\Delta g(X_s)\mathrm{d}s+\frac{\partial g}{\partial x^k}(X_s)\mathrm{d}W_s^{(k)}\end{aligned}$$

这里我们采用爱因斯坦求和记号，一个相同的上标和下标表示求和。将上面的式子写成积分形式就是

$$g(X_t)=\int_0^t\frac{1}{2}\Delta g(X_s)\mathrm{d}s+\int_0^t\frac{\partial g}{\partial x^k}(X_s)\mathrm{d}W_s^{(k)}$$

两边取期望，注意到伊藤积分的期望为 0，所以有：

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^d}g(x)\cdot\rho(t,x)\mathrm{d}x=\mathbb{E}g(X_t)=\mathbb{E}\int_0^t\frac{1}{2}\Delta g(X_s)\mathrm{d}s+0=\int_0^t\frac{1}{2}\mathbb{E}\Delta g(X_s)\mathrm{d}s\\=\int_0^t\int_{\mathbb{R}^d}\frac{1}{2}\rho(s,x)\Delta g(x)\mathrm{d}x\mathrm{d}s=\int_0^t\int_{\mathbb{R}^d}\frac{1}{2}g(x)\Delta\rho(s,x)\mathrm{d}x\mathrm{d}s\end{aligned}$$

两边关于时间 t 求导就得到：

$$\int_{\mathbb{R}^d}g(x)\cdot\frac{\partial\rho}{\partial t}(t,x)\mathrm{d}x=\int_{\mathbb{R}^d}g(x)\cdot\frac{1}{2}\Delta\rho(t,x)\mathrm{d}x$$

注意到上面的式子对任意的二阶可微函数都成立，所以我们就知道，密度函数满足热方程：

$$\begin{cases}\frac{\partial}{\partial t}\rho(t,x)=\frac{1}{2}\Delta\rho(t,x)\\ \rho(0,x)=\rho_0(x)\end{cases}$$

更进一步，因为 $X_t=X_0+W_t$ 的概率密度 $\rho(t,x)$ 可以直接写出来，所以我们还可以得到：

结论 2.1 上面的热方程的一个解为：

$$\rho(t,x)=\left(N(0,t)*\rho_0\right)(x)=\int_{\mathbb{R}^d}\frac{1}{(2t\pi)^{d/2}}\exp(\frac{-|x-y|^2}{2t})\cdot\rho_0(y)\mathrm{d}y$$

3　布朗运动的条件期望

另一种得到热方程的办法是，我们直接选取一个三阶可微、平方可积（且三阶导有界）的函数 f，并考虑条件期望

$$u(t,x) = \mathbb{E}\left(f(W_{t+\delta}) \mid W_\delta = x\right)$$

这里 $\delta > 0$ 是一个小常数，用于保证上面的式子有意义。严格来说，u 应该由下面的积分恒等式定义：

$$\begin{aligned}\int_U u(t,x)\,\mathrm{d}x &= \mathbb{E}(f(W_{t+\delta}) \mid W_\delta \in U) \\ &= \frac{1}{P(W_\delta \in U)} \int_U \mathrm{d}x \int_{\mathbb{R}^d} f(y)\cdot p(W_{t+\delta} - W_\delta = y - x, W_\delta = x)\,\mathrm{d}y \\ &= \frac{\int_{U\times\mathbb{R}^d} \frac{1}{(2t\pi)^{d/2}} \exp(\frac{-|x-y|^2}{2t} + \frac{-|x|^2}{2\delta})\cdot f(y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y}{\int_U \exp(-\frac{|x|^2}{2\delta})\,\mathrm{d}x}, \quad \forall U \subseteq \mathbb{R}^d\end{aligned}$$

从上面的等式可以进一步写出 $u(t,x)$ 的具体表达式。写出后，我们会发现它不依赖 δ 的选取，且和上一小节最后给出的表达式是类似的：

$$u(t,x) = \left(N(0,t) * f\right)(x) = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{1}{(2t\pi)^{d/2}} \exp(\frac{-\left|x-y\right|^2}{2t})\cdot f(y)\mathrm{d}y$$

为了书写的方便，我们后面认为 $\delta = 0$（哪怕这时 u 并不是良定义的）。

这里我们并不关心 u 的具体表达式，我们希望直接从 u 的定义证明 u 满足热方程，并将 u 的定义与路径积分联系起来。

我们对 f 做泰勒展开

$$\begin{aligned}f(W_{t+s}) - f(W_t) =& \frac{\partial f(W_t)}{\partial x^k}(W_{t+s}^{(k)} - W_t^{(k)}) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(W_t)}{\partial x^i \partial x^j}(W_{t+s}^{(i)} - W_t^{(i)})(W_{t+s}^{(j)} - W_t^{(j)}) \\ &+ \frac{1}{6}\frac{\partial^3 f(\xi)}{\partial x^i \partial x^j \partial x^l}(W_{t+s}^{(i)} - W_t^{(i)})(W_{t+s}^{(j)} - W_t^{(j)})(W_{t+s}^{(l)} - W_t^{(l)})\end{aligned}$$

然后固定 $W_t = y$，对 $W_{t+s} - W_t$ 取期望。等式右边的前两项可以直接计算，而利用 f 的三阶导数有界可以证明，展开式的最后一项在取了期望之后为 s 的高阶无穷小 $o(s)$，所以我们就得到了：

$$\mathbb{E}(f(W_{t+s}) \mid W_t) - f(W_t) = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(W_t)}{\partial x^i \partial x^j}\delta^{ij} s + o(s) = \frac{s}{2}\Delta f(W_t) + o(s).$$

在上面的式子里固定 $W_0 = x$，然后再对 W_t 取期望就会得到：

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(f(W_{t+s}) \mid W_0 = x) - \mathbb{E}(f(W_t) \mid W_0 = x) &= \frac{s}{2}\mathbb{E}(\Delta f(W_t) \mid W_0 = x) + o(s) \\ &= \frac{s}{2}\Delta\big(\mathbb{E}(f(W_t) \mid W_0 = x)\big) + o(s),\end{aligned}$$

其中最后一个等号可以靠将期望写成积分后使用分部积分公式可以得到。根据 $u(t,x)$ 的定义，上面的等式可以重写为

$$\frac{u(t+s,x)-u(t,x)}{s} = \frac{1}{2}\Delta u(t,x) + \frac{1}{s}o(s).$$

我们在上面的式子里令 $s \to 0$，就得到了 $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{2}\Delta u$，也就是 u 的确为热方程的解。

此外，我们可以很容易算出

$$u(0,x) = \mathbb{E}(f(W_0) \mid W_0 = x) = f(x)$$

所以实际上我们构造的 $u(t,x)$ 是初值问题

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} u = \frac{1}{2}\Delta u \\ u(0,x) = f(x) \end{cases}$$

的一个解。

在这一小节的最后，我们提供另一种解释热方程的初值问题的解

$$u(t,x) = \mathbb{E}(f(W_t) \mid W_0 = x)$$

的方式，这种解释提供了将偏微分方程的解表示路径积分的一个自然的动机。

我们设 W_t 是概率空间 $(\Omega, \mathcal{F}, \mu)$ 上的函数，其中 Ω 是一个集合，mu 是定义在 $\mathcal{F}$ 上的测度。那么 Ω 中的每个元素 ω 都给出了粒子的一种可能的运动路径 $W_t(\omega)$. 此外，我们可以相信，粒子的任何一种路径都可以由 Ω 中的一个元素 ω 表示，这样我们可以得到 $\mathbb{R}^d$ 中全体连续道路构成的空间

$$\mathcal{P}_t = \{\gamma\colon [0,t] \mid \gamma \text{ is continuous}\}$$

上的一个测度，我们仍然将其记为 μ. 所以我们原先的定义就变成了：

$$u(t,x) = \int_{\{W_0(\omega)=x\}} f(W_t(\omega))\,\mathrm{d}\mu = \int_{\{\gamma \in \mathcal{P}_t \mid \gamma(0)=x\}} f(\gamma(t))\mathrm{d}\mu$$

这一等式告诉我们，在选取了适当的测度之后，热方程的解可以表示为有关 $\mathbb{R}^d$ 上全体道路的一个积分。这一想法和路径积分的想法不谋而合（例如 [2] 中展示了另一种将热方程的解表示为路径积分的办法）。一般而言，Feynman-Kac 公式给出了适用于更加一般的抛物方程的结果。

参考文献

[1] Lawler, G.F., 2010. Random walk and the heat equation, Student mathematical library. American Mathematical Society, Providence, R.I.

[2] Hall, B.C., 2013. Quantum Theory for Mathematicians, Graduate Texts in Mathematics. Springer New York, New York, NY. https://doi.org/10.1007/978-1-4614-7116-5