第 23 讲 Brown 运动与随机微分方程

教学目的： Brown 运动是物理现象，Wiener 过程是对这最简单的随机过程的数学描述，可以从动力学的随机微分方程和概率论的 Fokker-Planck 方程从两个侧面做等价性描写，开拓着对数学物理问题的研究视野，深化对真实世界的随机性描述和确定性描述之间神秘联系的认识。

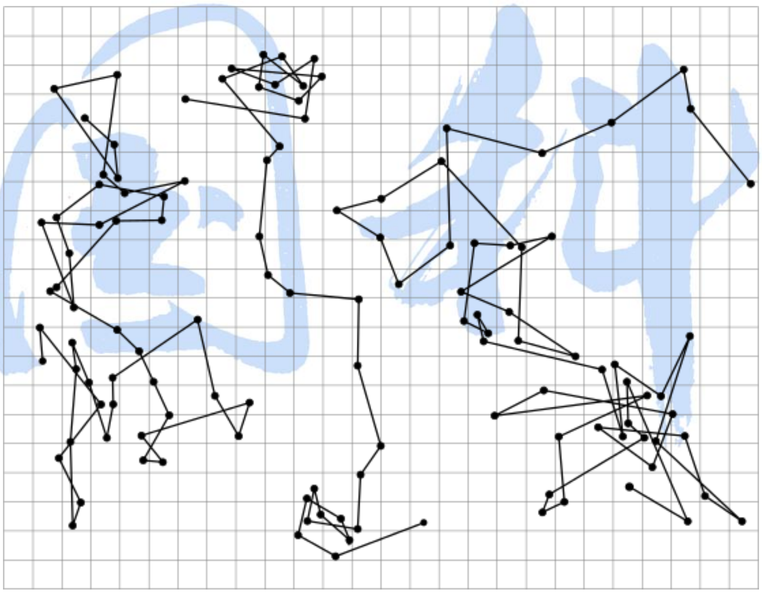
主要内容：

§1 Brown 运动 4
1.1 Einstein-Smoluchowski 理论 4
1.2 Langevin 方程 8
1.3 随机游动问题 12
§2 Wiener 过程 15
2.1 Fokker-Planck 方程 17
2.2 Wiener 过程 21
2.3 随机积分 25
§3 随机微分方程 28
3.1 非线性 Langevin 方程 28
3.2 Feynman-Kac 公式 33
3.3 Newton 位势 38
习题 23 44

参考书目：

1. N. G. Van Kampen, Stochastic Processes in Physics and Chemistry, 3rd Edition, Elesever , 2007.
2. Alexandre J. Chorin and Ole H. Hald, Stochastic Tools for Mathematics and Science, 2ed Edition, Springer, 2009.
3. Kai Lai Chung, Green, Brown, and Probability and Brownian Motion on the Line, World Sci. Pub. Com., 2002.
4. M. Scott, Applied Stochastic Processes in Science and Engineering, University of Waterloo, 2013.

1827 年，英国植物学家 Robert Brown[1]利用普通显微镜观察悬浮于水中的花粉粒时，发现这些花粉粒会做连续快速而不规则的随机移动，这种移动称为 Brown 运动。生物学家后来发现悬浮于液体或空气中直径小于 0.04 公分的粒子都会产生 Brown 运动。譬如，当阳光射进暗室时，就很容易从光束中观察到灰尘粒子在空气中产生 Brown 运动的现象。19 世纪初生物学家还以为 Brown 运动是由于粒子本身是“活的”。直到 1917 年这种粒子“生机说”才被 D'Arcy Thompson 所推翻，Brown 运动发生的原因是粒子与液体或气体分子连续互相碰撞的结果。1908 年，Jean Perrin 进一步实验最终确认，因为“他的工作对物质不连续结构”的贡献而获得 1926 年物理诺贝尔奖。



Three tracings of the motion of colloidal particles of radius 0.53 μm, as seen under the microscope, are displayed. Successive positions every 30 seconds are joined by straight line segments (the mesh size is 3.2 μm. From Jean Baptiste Perrin, *Les Atomes*,

实验发现[2]，Brown 运动有下列主要特性：

(i) 粒子的运动由平移及及转移所构成，显得非常没规则而且其轨迹几乎是处处没有切线；

(ii) 粒子之移动显然互不相关，甚至于当粒子互相接近至比其直径小的距离时也是如此；

[1] Robert Brown, A brief Account of Microscopical Observations made in the Months of June, July, and August, 1827, on the Particles contained in the Pollen of Plants; and on the general Existence of active Molecules in Organic and Inorganic Bodies, Philosophical Magazine N. S. 4 (1828), 161-173.

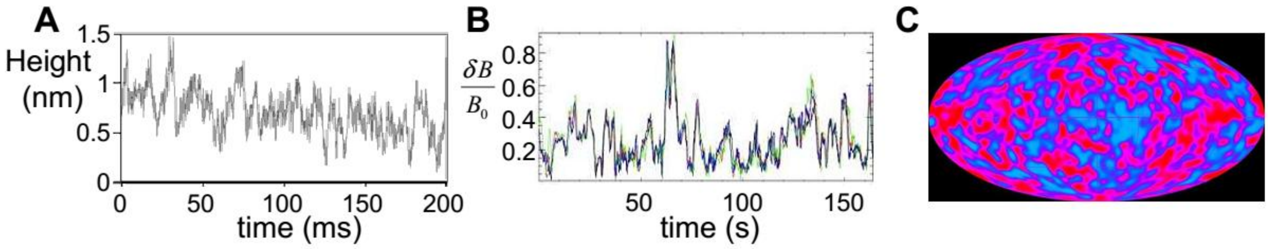
[2] Jean Perrin, Brownian movement and molecular reality, translated from the Annales de Chimie et de Physique, 8me Series, 1909, by F. Soddy, Taylor and Francis, London, 1910.

(iii) 粒子越小或液体粘性越低或温度越高时，粒子的运动越活泼；

(iv) 粒子的成分及密度对其运动没有影响；

(v) 粒子的运动永不停止。

其中，关于第一点，数学上的确存在处处连续而处处不可微分的函数。例如 Weierstrass 函数 $\sum_{n=1}^{\infty} 2^{-2}\cos(2^n t)$ 就是如此。事实上，从 Brown 运动的数学定义，可证明几乎每一 Brown 运动的轨迹皆处处不可微分，因此也就没有切线。第二点曾被 Brown 所提及。第五点则是由观察一个样存二十年及观察一个千年石英矿中之液体所得到的结论。



Examples of Random Functions A) Height of a proteinmolecule above a catalytic surface. B) Fluctuations in the magnetic field around the North pole. C) Example of a random field - The cosmic background radiation.

在 Newton 粒子力学导出 Brown 运动的程序仍然是不完整的。这个问题或其一种表述，是从以下理论推断出的：

Einstein – Smoluchowski
Ornstein - Uhlenbeck
Maxwell - Boltzmann
Hamilton - Jacobi

Einstein 及 Smoluchovski 发现不管粒子的运动有多么不规则，Brown 运动仍可以用几率律来分析，其研究说明了粒子在一段时间内之位移是根据常态分配的。Einstein 的工作可说是 Brown 运动动力论的先驱。Langevin 方程和 Fokker–Planck 方程都描述连续 Markov 过程的物理，即无记忆随机过程。事实上，Einstein 和 Langevin 使用他们自己的方法导出同样的结果：Brown 粒子的均方位移随时间的开方而增加。然而，Brown 运动的 Langevin 分析比 Einstein 的分析更一般和更正确。特别是 Langevin 引入例如随机力推动 Brown 粒子在速度空间的游动。而

Einstein 的工作完全在位形空间。用当代的术语说，Langevin 将 Brown 粒子速度描述为 Ornstein–Uhlenbeck 过程，其位移为速度的积分，Einstein 将 Brown 粒子描写为无漂移 Wiener 过程. 前者包含后者，在“粗网格”极限时达到后者。

§1 Brown 运动

自从 1905 年起，Einstein-Smoluchowski 对 Brown 运动问题的统计处理成为基础工作。Einstein 和 Smoluchowski 理论看起来表面上非常不同。一个利用粒子运动动力学中一种重要方式，而另一个是纯粹统计理论。P. Langevin [3](1908 年) 提供两个概念之间的联系。流体中悬浮粒子受到溶液中分子施加的作用力，这种作用力是平均值与关于平均值的涨落之和 Langevin 的想法是要动力学处理平均作用力和概率处理残余的涨落部分。用 Langevin 的话说，他的方法比 Einstein 方法“infinitely more simple”。

1.1 Einstein-Smoluchowski 理论

虽然 Einstein 的工作按时间顺序比 Smoluchowski 早几个月，Smoluchowski 的工作基于具体详细的动理学模型：碰撞硬球。因而它给涨落背后的机理在物理上深入。与此同时，需要作许多近似以推断模型结果。因此理论不容易普遍适用到其他情况的。相反地 Einstein 的考虑基于一般性质的统计假设而不依赖于特定的模型，这既是这一理论的长处又是弱点。 长处是易于应用而且便于推广，弱点是对微观动力学时间尺度上的过程视而不见。

物理系统的时间尺度通常可分为微观 (microscopic)，宏观 (macroscopic) 和介观 (mesoscopic) 三个范围。微观时间尺度适于阐明基本动态事件，诸如碰撞持续时间或碰撞间的平均时间等。宏观时间尺度适于明实验室规模的现象，例如，弛豫时间可衡量大小的尺度。介

[3] P. Langevin, On the Theory of Brownian Motion. C. R. Acad. Sci. (Paris) 146: 530–533, 1908.

观时间刻度位于这两个范围之间，时间间隔足够长包含很多小事件，又足够短足以为观测时间尺度上有效地无穷小的。Smoluchowski 是微观的理论，Einstein 是介观理论。

设悬浮在$\boldsymbol{r}$和$\boldsymbol{r}+\mathrm{d}\boldsymbol{r}$之间单位体积中的$f(\boldsymbol{r},t)$个 Brown 粒子受到外部位势梯度力作用

$$\boldsymbol{K}=-\mathrm{grad}\, U(\boldsymbol{r})$$

考虑闭合曲面S包围的体积V，计算由于外力$\boldsymbol{K}$的作用引起穿越闭合曲面S的粒子流$\boldsymbol{J}_d$，运用 Gauss 定理

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V f(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}V=-\oint \boldsymbol{J}_d\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S=\int_V \mathrm{div}\boldsymbol{J}_d\mathrm{d}V$$

得到连续性方程

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\mathrm{div}\boldsymbol{J}_{\mathrm{d}}=0$$

既然，

$$\boldsymbol{J}_{\mathrm{d}}=f\boldsymbol{v}$$

其中$\boldsymbol{v}$是粒子的漂移速度，满足关系

$$\boldsymbol{K}-\zeta\boldsymbol{v}=0$$

$-\zeta\boldsymbol{v}$ 是粘滞摩擦力，ζ是粒子的拖曳系数，漂移粒子流为

$$\boldsymbol{J}_{\mathrm{d}}=-\frac{f}{\zeta}\mathrm{grad}\, U(\boldsymbol{r})$$

至此没有考虑粒子的热涨落，即 Brown 运动。为此增加扩散性

$$\boldsymbol{J}_{\mathrm{diff}}=-D\mathrm{grad}\, f(\boldsymbol{r},t)$$

其中$D=kT/\zeta$。合并得到 Smoluchowski 方程

$$\frac{\partial f}{\partial t}=D\mathrm{div}\left[\mathrm{grad}\, f+\frac{1}{kT}f\mathrm{grad}\, U\right]$$

实际上，Smoluchowski 详细考察了粒子之间的碰撞作用。这个理论的最大的问题是不宜推广，依赖于具体的动理学(kinetic)模式；而早于发表的 Einstein 理论没有如此困难。Albert

Einstein[4]假设:

(i) 每个粒子经历一次运动，与系统的其它粒子无关;

(ii) 粒子在某一时刻的运动与其它任意时刻的运动无关，只要时间间隔τ足够长

因此，粒子在时刻t的运动与在时刻$t\pm\tau$的运动无关，

设 Brown 运动粒子在时刻t出现在位置x和$x+\mathrm{d}x$之间的几率为$f(x,t)$，经历时间τ后，同样体积的流体出现在位置x'，每个粒子可以取不同的数值，设粒子从x'的附近进入x'的几率$\phi(\Delta,\tau)$是$\Delta=x'-x$和τ的函满足积分方程

$$f(x,t+\tau)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(x+\Delta,t)\phi(\Delta,\tau)\mathrm{d}\Delta$$

正负两个方向的运动是等几率的，即无偏随机游动，则$\phi(\Delta,\tau)$满足

$$\phi(\Delta,\tau)=\phi(-\Delta,\tau)$$

设τ足够小，可以将函数$f(x,t+\tau)$在t时刻展开

$$f(x,t+\tau)=f(x,t)+\tau\frac{\partial f}{\partial t}+O(\tau^2)$$

同时可以$f(x+\Delta,t)$对小位移Δ展开

$$f(x+\Delta,t)=f(x,t)+\Delta\frac{\partial f}{\partial x}+\frac{\Delta^2}{2!}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+O(\Delta^3)$$

代入积分方程，得到

$$f(x,t)+\tau\frac{\partial f}{\partial t}=f(x,t)\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(\Delta,\tau)\mathrm{d}\Delta+\frac{\partial f}{\partial x}\int_{-\infty}^{+\infty}\Delta\phi(\Delta,\tau)\mathrm{d}\Delta+\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\Delta^2}{2!}\phi(\Delta,\tau)\mathrm{d}\Delta+\cdots$$

既然$\phi(\Delta,\tau)$是几率分布密度函数且 $\phi(\Delta,\tau)=\phi(-\Delta,\tau)$，因此必须有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(\Delta,\tau)\mathrm{d}\Delta=1,\quad \int_{-\infty}^{+\infty}\Delta\phi(\Delta,\tau)\mathrm{d}\Delta=\bar{\Delta}=0,\quad \int_{-\infty}^{+\infty}\Delta^2\phi(\Delta,\tau)\mathrm{d}\Delta=\overline{\Delta^2}$$

其中对位移的平均$\bar{\Delta}$是关于每一个 Brown 粒子的。假设$O\left(\overline{\Delta^4}\right)=O\left(\overline{\tau^2}\right)$，可以得到扩散方程

$$\frac{\partial f}{\partial t}=D\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

[4] Paul A. Schilpp, editor, Albert Einstein: Philosopher-Scientist", The Library of Living Philosophers, Inc., Evanston, Illinois, 1949.

其中扩散系数定义为

$$D=\frac{\overline{\Delta^2}}{2\tau}>0$$

如果$f(x,0)=\delta(x)$，而且几率密度函数$f(x,t)$是归一化的

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x,t)\mathrm{d}x=1$$

扩散方程有解

$$f(x,t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{4Dt}},\quad -\infty<x<\infty$$

由此计算 Brown 粒子的均方根位移

$$\overline{x^2}=2Dt$$

Einstein 假设 Brown 粒子受到位势场$U(x)=-Kx$的作用，满足 Maxwell-Boltzmann 分布

$$f(x,t)=f_0\mathrm{e}^{-\frac{U}{kT}}\quad\Longrightarrow\quad\frac{1}{f}\frac{\partial f}{\partial x}=\frac{K}{kT}$$

球体 Brown 粒子在粘性系数η的流体中受到的摩擦阻尼与位势力平衡

$$-K+\zeta v=0,\quad v=\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$$

与前述 Smoluchowski 论述相仿，扩散引起的粒子流与之平衡

$$D\frac{\partial f}{\partial x}=\frac{K}{\zeta}f$$

与 Maxwell-Boltzmann 分布的结果比较，得到

$$D=\frac{\overline{\Delta^2}}{2\tau}=\frac{kT}{\zeta}\quad\Longrightarrow\quad\overline{\Delta^2}=\frac{2kT}{\zeta}\tau$$

为什么是这种结果等于 Einstein 的实际仅用于目的，并不是为所有的时间？Einstein 全部在 Brown 粒子的构形空间（configuration space）中工作，没有引入粒子的速度。因此完全忽视了粒子的惯性和速度持续存在的可能性。换句话说，时间很短，r 以后的，质点的位移应该是独立的，应该超过 M/英镑。另一方面，Langevin 在粒子的相空间（phase space）中工作，并

且是能够处理速度弛豫（relaxation）。Langevin 的阐述是在比 Einstein 更精细的尺度上。

1.2 Langevin 方程

Einstein 从合理的假说开始，导出并求解支配 Brown 粒子概率密度的时间演化的偏微分方程：Fokker－Planck 方程；Langevin 将 Newton 第二定律用于布朗粒子,发现了随机物理的“$F=ma$”，称为 Langevin 方程。

$$m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}=-\zeta\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}+F(t)$$

Langevin 方法表面上看似简单，代价是存在新的不寻常性质的数学对象：正态白噪声和随机微分方程。这是第一个随机微分方程(Stochastic Differential Equation)。Langevin 假设涨落作用力 $F(t)$具有

(i) $F(t)$与位移$x(t)$是独立无关的；

(ii) $F(t)$与位移$x(t)$的变化相比是极其快速的；

(iii) $F(t)$的系综平均$\overline{F(t)}=0$。

$$\overline{F(t)F(t')}=2\zeta kT\delta(t-t')$$

其中$\delta(t)$是 Dira 的δ函数，$2\zeta kT$称为谱密度；涨落作用力$F(t)$如果经过滤波器，谱密度则不是频率的函数，也就是白噪声(white noise)，形式上说

低通滤波器（英語：Low-pass filter）容许低频信号通过，但减弱（或减少）频率高于截止频率的信号的通过。对于不同滤波器而言，每个频率的信号的减弱程度不同。

$$\overline{F(t)F(t')}=\overline{F(t)F(t+\tau)}=\lim_{T'\to\infty}\int_0^{T'}F(t)F(t+\tau)\mathrm{d}\tau$$

$F(t)$是中心正态随机变量。Langevin 方程是第一个随机微分方程，Langevi 用x乘以方程两端，

$$mx(t)\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}=-\zeta x(t)\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}+x(t)F(t)$$

注意到

$$x(t)\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}x^2}{\mathrm{d}t},\quad x(t)\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}x^2}{\mathrm{d}t}\right)$$

得到

$$\frac{m}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}x^2}{\mathrm{d}t}\right)-m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2=\frac{\zeta}{2}\frac{\mathrm{d}x^2}{\mathrm{d}t}-x(t)F(t)$$

求系综平均

$$\frac{m}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}\overline{x^2}}{\mathrm{d}t}\right)-m\overline{\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2}=\frac{\zeta}{2}\frac{\mathrm{d}\overline{x^2}}{\mathrm{d}t}-\overline{x(t)F(t)}$$

既然

$$\overline{x(t)F(t)}=0$$

考虑热力学平衡，满足 Maxwell 分布，Brown 粒子达到平衡

$$\frac{1}{2}m\overline{\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2}=\frac{1}{2}kT$$

因此

$$\frac{m}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}\overline{x^2}}{\mathrm{d}t}\right)+\frac{\zeta}{2}\frac{\mathrm{d}\overline{x^2}}{\mathrm{d}t}=kT$$

这是一个关于$\overline{x^2}$的常微分方程，有解

$$\frac{\mathrm{d}\overline{x^2}}{\mathrm{d}t}=Ce^{-\beta t}+\frac{2kT}{\zeta},\quad \beta=\zeta/m$$

当$t\gg\beta^{-1}$时，即有

$$\frac{\mathrm{d}\overline{x^2}}{\mathrm{d}t}=\frac{2kT}{\zeta}$$

此时意味 Brown 粒子的惯性作用可以忽略不计。对上式从$t=0$开始积分，得到

$$\overline{x^2(t)}-\overline{x^2(0)}=\frac{2kT}{\zeta}t$$

若令$\overline{x^2(0)}=0$和$\overline{x^2(t)}=\overline{(\Delta x)^2}$，就得到

$$\overline{(\Delta x)^2}=\frac{2kT}{\zeta}t$$

就得到了 Einstein 的结果。

还可以得到摩阻系数ζ与随机力$F(t)$的关系。由于$\overline{F(t)F(t+\tau)}$是τ的偶函数

$$\int_0^\infty \overline{F(t)F(t+\tau)}\mathrm{d}\tau = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^\infty \overline{F(t)F(t+\tau)}\mathrm{d}\tau = \zeta kT\int_{-\infty}^\infty \delta(\tau)\mathrm{d}\tau = \zeta kT$$

因此

$$\zeta = \frac{1}{kT}\int_0^\infty \overline{F(t)F(t+\tau)}\mathrm{d}\tau$$

称为涨落耗散定理(fluctuation dissipation theorem)[5]。

Einstein 理论与 Langevin 方程的结果，Brown 粒子的均方位移

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \frac{kT}{\zeta}|t|$$

都采用了时间远远大于摩阻弛豫时间$t \gg \beta^{-1} = m/\zeta$假设，以便使用速度的 Maxwell 分布。在时间很小时，存在均方根不可导的瑕疵。不同的是，Ornstein 和 Uhlenbeck 没有采用速度平衡假设，得到

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \frac{2kT}{m\beta^2}\left(\beta t - 1 + \mathrm{e}^{-\beta|t|}\right)$$

结论，在短时间$t \ll \beta^{-1}$，有

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \frac{kT}{m}t^2$$

是可导的；而当$t \gg \beta^{-1}$时，得到 Einstein 的结果。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t) = -\beta U(t) + R(t),\quad \beta = \frac{\zeta}{m} > 0$$

其中

$$\overline{R(t_1)R(t_2)} = 2D\delta(t_1 - t_2),\quad D = \zeta kT$$

设粒子从确定的相空间位置(u_0, x_0)出发，则状态矢量有分量

$$\Delta X = X(t) - x_0 = \frac{u_0}{\beta}\left(1 - \mathrm{e}^{-\beta t}\right)U(t) + \frac{1}{m\beta}\int_0^t \left[1 - \mathrm{e}^{-\beta(t-s)}\right]R(s)\mathrm{d}s$$

[5] R. Kubo, The fluctuation-dissipation theorem, Rep. Prog. Phys. 29 255,1966.

$$U(t)=u_0\mathrm{e}^{-\beta t}+\frac{1}{m}\int_0^t \mathrm{e}^{-\beta(t-s)}R(s)\mathrm{d}s$$

因此

$$\langle\Delta X\rangle=\frac{u_0}{\beta}\left(1-\mathrm{e}^{-\beta t}\right)$$

$$\begin{aligned}\langle(\Delta X)^2\rangle&=\frac{u_0^2}{\beta^2}\left(1-\mathrm{e}^{-\beta t}\right)^2+\frac{1}{m^2\beta^2}\int_0^t \mathrm{d}s\int_0^t \mathrm{d}s'\left[1-\mathrm{e}^{-\beta(t-s)}\right]\left[1-\mathrm{e}^{-\beta(t-s')}\right]\langle R(s)R(s')\rangle\\&=\frac{u_0^2}{\beta^2}\left(1-\mathrm{e}^{-\beta t}\right)^2+\frac{2D}{m^2\beta^2}\int_0^t \mathrm{d}s\int_0^t \mathrm{d}s'\left[1-\mathrm{e}^{-\beta(t-s)}\right]\left[1-\mathrm{e}^{-\beta(t-s')}\right]\delta(s-s')\end{aligned}$$

因为

$$\int_0^t \mathrm{d}s'\delta(s-s')\left[1-\mathrm{e}^{-\beta(t-s')}\right]=1-\mathrm{e}^{-\beta(t-s)}$$

所以

$$\begin{aligned}\langle(\Delta X)^2\rangle&=\frac{u_0^2}{\beta^2}\left(1-\mathrm{e}^{-\beta t}\right)^2+\frac{2D}{m^2\beta^2}\int_0^t \mathrm{d}s\int_0^t \mathrm{d}s'\left[1-2\mathrm{e}^{-\beta(t-s)}-\mathrm{e}^{-2\beta(t-s)}\right]\\&=\frac{u_0^2}{\beta^2}\left(1-\mathrm{e}^{-\beta t}\right)^2+\frac{2Dt}{m^2\beta^2}+\frac{2D}{m^2\beta^3}\left[-3+4\mathrm{e}^{-\beta t}-\mathrm{e}^{-2\beta t}\right]\end{aligned}$$

在 Maxwell-Boltzmann 分布下求的 Langevin 方程解，称为稳态解(stationary solution)，也就是在热力学平衡下，均方速度为

$$\langle U^2\rangle=\frac{kT}{m}$$

速度相关函数。这可改变方程

$$U(t)=u_0\mathrm{e}^{-\beta t}+\frac{1}{m}\int_0^t \mathrm{e}^{-\beta(t-s)}R(s)\mathrm{d}s$$

积分下限为$-\infty$并舍去与u_0有关的项得到。对于不同时刻$t_1\neq t_2$，有

$$U(t_1)=\frac{1}{m}\int_0^{t_1}\mathrm{e}^{-\beta(t_1-s)}R(s)\mathrm{d}s\,,\quad U(t_2)=\frac{1}{m}\int_0^{t_2}\mathrm{e}^{-\beta(t_2-s)}R(s)\mathrm{d}s$$

因此有

$$\langle U(t_1)U(t_2)\rangle = \frac{1}{m^2}\int_{-\infty}^{t_1}\int_{-\infty}^{t_2} \mathrm{e}^{-\beta(t_1+t_2)}\,\mathrm{e}^{-\beta(s+s')}\langle R(s)R(s')\rangle \mathrm{d}s\,\mathrm{d}s'$$

$$= \frac{2D}{m^2}\int_{-\infty}^{t_1}\int_{-\infty}^{t_2} \mathrm{e}^{-\beta(t_1+t_2)}\,\mathrm{e}^{-\beta(s+s')}\delta(s-s')\mathrm{d}s\,\mathrm{d}s' = \frac{kT}{m}\mathrm{e}^{-\beta|t_1-t_2|}$$

均方位移为

$$\langle(\Delta X)^2\rangle = 2\int_0^t (t-s)\,\langle U(t)U(s)\rangle \mathrm{d}s = \frac{2kT}{m\beta^2}\left(\beta t - 1 + \mathrm{e}^{-\beta|t|}\right)$$

1.3 随机游动问题

1905 年，现代数理统计学奠基人 K. Pearson 在 Nature 上提出随机移动（Random Walk）问题[6]。

The Problem of the Random Walk.

CAN any of your readers refer me to a work wherein I should find a solution of the following problem, or failing the knowledge of any existing solution provide me with an original one? I should be extremely grateful for aid in the matter.

A man starts from a point O and walks *l* yards in a straight line; he then turns through any angle whatever and walks another *l* yards in a second straight line. He repeats this process *n* times. I require the probability that after these *n* stretches he is at a distance between *r* and $r+\delta r$ from his starting point, O.

The problem is one of considerable interest, but I have only succeeded in obtaining an integrated solution for *two* stretches. I think, however, that a solution ought to be found, if only in the form of a series in powers of $1/n$, when *n* is large. KARL PEARSON.

The Gables, East Ilsley, Berks.

仿照 Chandrasekhar[7]，假设一个粒子沿一维直线每次以相等的步长l随机移动。设直线为x方向，粒子要么沿$+x$方向移动，要么沿负$-x$方向移动，几率[8]相等各为$1/2$。经过N次移动后，

[6] K. Pearson, The Problem of the Random Walk. Nature. 72, 294,1905

[7] S. Chandrasekhar, Stochastic Problems in Physics and Astronomy¸Rev. Mod. Phys. 15: 1-89,1943

[8] Probabilty 一词，数学家喜欢译成概率，物理学家喜欢译成"几率"。见王竹溪，统计物理学导论，高等教育出版社，1963.

粒子可能位于下列点

$$-N,-N+1,\cdots,-1,0,+1,\cdots,N-1,N$$

中任何一点。问题是移动N步后位于点m的几率$p(m,N)$是多少。

在每一步中，向前和向后可能性是一样的，而且与上一步的选择无关。从原来位置前进的距离为$\pm l\pm l\pm l\cdots$，共有N项。因序列中出现正负号的机会相等，即在确定方向的所有可能的具有相同的几率。换言之，任意给定N步的几率2^{-N}。几率$W(m,N)$就是2^{-N}与移动N步后位于点m的序列数量的乘积。在移动N步后沿$+x$位于点m出的次数为$(N+m)/2$，而沿$-x$号的次数为$(N-m)/2$，不同序列的数量为

$$\frac{N!}{\left[\frac{1}{2}(N+m)\right]!\left[\frac{1}{2}(N-m)\right]!}$$

因此其

$$W(m,M)=\frac{N!}{\left[\frac{1}{2}(N+m)\right]!\left[\frac{1}{2}(N-m)\right]!}\left(\frac{1}{2^N}\right)$$

按照二项式系数表示

$$W(m,N)=C_{(N+m)/2}^{N}\left(\frac{1}{2^N}\right),\quad C_{(N+m)/2}^{N}=\frac{N!}{\left[\frac{1}{2}(N+m)\right]!\left[\frac{1}{2}(N-m)\right]!}$$

也就是有 Bernoulli 分布，$(N+m)/2$的数学期望和均方差为

$$\frac{1}{2}\langle N+m\rangle=\frac{1}{2}N,\quad \left\langle\left[\frac{1}{2}(N+m)-\frac{N}{2}\right]^2\right\rangle=\frac{N}{4}$$

因此

$$\langle m\rangle=0,\ \langle m^2\rangle=N$$

当步数N是个大数，$m\ll N$，可以运用 Sterling 公式：

$$\log(n!)=\left(n-\frac{1}{2}\right)\log n-n+\frac{1}{2}\log 2\pi\,,\quad n\to+\infty$$

简化$W(m,N)$的表示。当$N\to+\infty$且$m\ll N$，有

$$\log W(m,N)\simeq\left(N-\frac{1}{2}\right)\log N-\frac{1}{2}(N+m+1)\log\left[\frac{N}{2}\left(1+\frac{m}{N}\right)\right]$$
$$-\frac{1}{2}(N-m+1)\log\left[\frac{N}{2}\left(1-\frac{m}{N}\right)\right]-\frac{1}{2}\log 2\pi-N\log 2$$

既然当$m\ll N$时，有级数表示

$$\log\left[\left(1\pm\frac{m}{N}\right)\right]=\pm\frac{m}{N}-\frac{1}{2}\left(\frac{m}{N}\right)^2+O\left[\left(\frac{m}{N}\right)^3\right]$$

则有

$$\log W(m,N)\simeq\left(N+\frac{1}{2}\right)\log N-\frac{1}{2}\log 2\pi-N\log 2$$
$$-\frac{1}{2}(N+m+1)\left[\log N-\log 2+\frac{m}{N}-\frac{1}{2}\left(\frac{m}{N}\right)^2\right]$$
$$-\frac{1}{2}(N+m+1)\left[\log N-\log 2-\frac{m}{N}-\frac{1}{2}\left(\frac{m}{N}\right)^2\right]$$

化简得到

$$\log W(m,N)\simeq-\frac{1}{2}\log N+N\log 2-\frac{1}{2}\log 2\pi-\frac{m^2}{2N}$$

换言之，移动N步后位于点m的几率为

$$W(m,N)=\left(\frac{2}{\pi N}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{m^2}{2N}\right)$$

引入从起始点起算的净位移

$$x=ml$$

作为变数。如果考虑沿直线的间隔Δx比步长l大得多，可以寻求N步之后位于区间$[x,x+\Delta x]$的几率$W(x,N)\Delta x$。显然有

$$W(x,N)\Delta x=W(m,N)\left(-\frac{\Delta x}{2l}\right)$$

因此有

$$W(x,N)=\frac{1}{\sqrt{2\pi Nl^2}}\exp\left(-\frac{x^2}{2Nl^2}\right)$$

设每单位时间内粒子移动n步，则历经时间t后粒子在区间$(x,x+\Delta x)$发现自己的几率$W(x,t)\Delta x$为

$$W(x,t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

其中

$$D=\frac{1}{2}Nl^2$$

依据 Fick 扩散理论，研究一维瞬时源扩散问题

$$\frac{\partial u}{\partial t}=D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},\ \ u(x,0)=\phi(x)$$

其中$-\infty<x<+\infty$，$t>0$，得到解

$$u(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}W(x',t)\phi(x+x')\mathrm{d}x'$$

如前，既然$W(x',t)$也是零均值方差t的随机变数$\eta(\omega)$的几率分布函数，因此解可以视为是随机函数$\phi\big(x+\eta(\omega)\big)$的数学期望

$$u(x,t)=E\big[\phi\big(x+\eta(\omega)\big)\big]$$

这与随机游动分析基本一致。虽然这个结论是对于N为大数、时间t较长的情况且作了简化假定下得到的，但基本上能反映流体质点扩散的实际，所以成为研究扩散问题的一个基础。

§2 Wiener 过程

1923 年，Norbert Wiener 首先把 Brown 运动当作随机过程 (Stochastic Process) 研究，物理上的 Brown 运动因此在数学上叫 Wiener 过程。Wiener 过程与 Poisson 过程构成了两种最基本的随机过程。Wiener 运动是过程是一种正态分布的独立增量连续随机过程。它是随机分析中基本概念之一，是随机过程理论中最重要最简单的 Markov 过程、鞅过程和 Ito(伊藤)过程。Brown 运动的第一个严格研究是 Wiener 和 Levy 给出的，因而这种随机过程也称作 Wiener 过程或 Wiener-Levy 过程. Wiener 最重要的贡献是他对 Brown 运动过程的样本函数性质的研究. 特别

证明 Brown 运动的样本函数或轨道是连续而且几乎处处不可微的函数.

随机过程是参数$t \in T$的随机变量族$\{X_t\}_{t\in T}$，定义在概率空间(Ω, H, P)中，取值于$\mathbb{R}^n$中。对于每个固定的$t \in T$，有随机变量

$$\omega \to X_t(\omega),\ \ \omega \in \Omega$$

对于固定的$\omega \in \Omega$，函数

$$t \to X_t(\omega),\ \ t \in T$$

称为X_t的路径。通常用下列函数刻画随机过程的概率特征：

(i) 均值函数：$E[X_t(\omega)] = \langle X_t(\omega)\rangle$;

(ii) 方差函数：$E[\{X_t(\omega) - E[X_t(\omega)]\}^2]$;

(iii) 有限维分布族：设$t_i \in T$，$1 \le i \le n$，记

$$F(x_1, t_1; \cdots; x_n, t_n) = P\left(X_{t_1} \le x_1, \cdots, X_{t_n} \le x_n\right) = \int\ p_n(x_1, t_1; \cdots; x_n, t_n)\mathrm{d}x_1 \cdots \mathrm{d}x_n$$

其全体

$$\left\{F(x_1, t_1; \cdots; x_n, t_n),\ \ t_1 \cdots, t_n \in T,\ \ n \ge 1\right\}$$

为随机过程的有限维分布，$p(x_1, t_1; \cdots; x_n, t_n)$称为分布密度函数。有限维分布完全决定该随机过程的概率特性。

选择有限维集合$t_i \in T$，$1 \le i \le n$，则$X_{t_1} \cdots, X_{t_n}$就是一组随机变量，可以定义联合概率分布为

$$\begin{gathered} p_1(x_1,) \\ p_2(x_1, t_1; x_2, t_2) \\ p_3(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3) \\ \cdots \end{gathered}$$

其中$p_1(x_1, t_1)$是随机变量$X(t_1)$在$\mathrm{d}x_1$内取值x_1的几率，$p_2(x_1, t_1; x_2, t_2)$是随机变量$X(t_1)$和$X(t_2)$在$\mathrm{d}x_1$和$\mathrm{d}x_2$内分别取值x_1和x_2的联合几率，与此类推。

联合概率分布$p(x_1, t_1; \cdots; x_n, t_n)$关于任意排列$j_1, j_2, \cdots, j_n$有

$$p_n\left(x_{j_1}, t_{j_1}; \cdots; x_{j_n}, t_{j_n}\right) = p_n(x_1, t_1; \cdots; x_n, t_n)$$

称为对称性(symmetry)；而且当$m < n$时，满足

$$p_m p_n(x_1, t_1; \cdots; x_n, t_n) = \int \ p_n(x_1, t_1; \cdots; x_m, t_m; x_{m+1}, t_{m+1}) \mathrm{d}x_{m+1}$$

称为相容性(compatibility);

条件概率分布函数$p_{n,n-k}(x_1, t_1; \cdots; x_k, t_k | x_{k+1}, t_{k+1}; \cdots; x_n, t_n)$满足关系

$$p_n(x_1, t_1; \cdots; x_n, t_n) = p_{n,n-k}(x_1, t_1; \cdots; x_k, t_k | x_{k+1}, t_{k+1}; \cdots; x_n, t_n) p_{n-k}(x_1, t_1; \cdots; x_{n-k}, t_{n-k})$$

2.1 Fokker-Planck 方程

最简单的随机过程就是无记忆过程，也就是说更正确的说，随机过程$X(t)$，$t \in T$称为没有记忆的或是纯粹随机的，因此对一切n，一个纯粹随机过程的n阶分布函数为

$$p_n(x_1, t_1; \cdots; x_n, t_n) = \prod_{j=1}^{n} p_1\left(x_j, t_j\right)$$

也就是说，知道了p_1就知道了各阶分布函数. 纯粹随机过程的一阶分布函数包含了这个过程的所有统计信息. 条件几率

$$p_{1,n-1}(x_1, t_1 | x_2, t_2; \cdots; x_n, t_n) = p_1(x_1, t_1)$$

逻辑上，比纯粹随机过程复杂些的是它的统计信息完全包含在它的二阶概率分布函数中的过程。具有这种性质的一类重要的随机过程是 Markov 过程.

随机过程$X(t)$，$t \in T$称为 Markov 过程，是指在对每个n和$t_1 < t_2 < \cdots < t_n$，

$$p_{1,n-1}(x_1, t_1 | x_2, t_2; \cdots; x_n, t_n) = p_{1,1}(x_1, t_1 | x_2, t_2)$$

这就意味着

$$p_n(x_1, t_1; \cdots; x_n, t_n) = p_{1,1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) p_{1,1}(x_2, t_2 | x_3, t_3) \cdots p_{1,1}(x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n)$$

$p_{1,1}(x_1, t_1 | x_2, t_2)$称为转移几率。这意味着 Markov 过程表示一族轨道，它在指定瞬时上给定所

有过去观察值的条件概率分布只依赖于最近的过去值，这是力学中一个质点的确定性轨道的概率模拟。在经典力学中，给定时刻t_2的轨道完全用在某时刻$t_1<t_2$的状态确定，不必知道t_1以前的状态. 主要关心叫做扩散过程的连续 Markov 过程. Markov 过程是各态历经(ergodic)的，时间平均与系综平均是等价的。

显然，连续参数的纯粹随机过程虽然数学上简单，但物理上是无法实现的，因为它意味着现在与过去之间的绝对独立性，不论它们之间相隔多近。在物理问题中，总是期望当t_1足够接近t_2时，$X(t_1)$依赖于$X(t_2)$. 在实际应用中，具有连续参数的纯粹随机过程是作为极限过程来考虑的，一个重要的例子是白噪声. 要确定是否一个随机过程是或不是连续的充分条件是知道的，但并不容易运用；验证的假设连续性标准往往是很难的。然而，对于 Markov 过程是一个相对简单的标准，如果

$$\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\int_{|x-y|>\varepsilon} p_{1,1}(x,t+\Delta t|y,t)\mathrm{d}x=0$$

对所有的$\varepsilon>0$，则随机过程$X(t)$是连续的。这种意味着对于而言，在足够短的时间间隔内的任意小有限跳跃不大可能。

对于随机过程$X(t)$，$t\geq 0$，称

$$X(t_1,t_2)=X(t_2)-X(t_1)，0\leq t_1<t_2$$

为随机变量增量(increment)。如果对一切$0\leq t_1<t_2<\cdots<t_n$，增量

$$X(t_1,t_2)，X(t_2,t_3)，\quad\cdots，X(t_{n-1},t_n)$$

相互独立的，就称随机过程$X(t)$，$t\geq 0$是一个独立增量随机过程. 实用上，这定义只用在连续参数的随机过程.

平稳(stationary)过程，对一切j

$$p_j\big(x_1,t_1+s;\cdots;x_j,t_j+s\big)=p_j\big(x_1,t_1;\cdots;x_j,t_j\big)$$

齐次方程（Homogeneous process）

$$p_2(x_1,t+\mathrm{d}t;x_2,t)=p_{1,1}(x_1,t+\mathrm{d}t|x_2,t)p_1(x_2,t)$$

对所有的积分

$$p_1(x_1,t+\mathrm{d}t)=\int p_{1,1}(x_1,t+\mathrm{d}t|x_2,t)p_1(x_2,t)\mathrm{d}x_2$$

对于

$$p_3(x_1,t_1;x_2,t_2;x_3,t_3)=p_{1,2}(x_1,t_1|x_2,t_2;x_3,t_3)p_2(x_2,t_2;x_3,t_3)$$

$$=p_{1,1}(x_1,t_1|x_2,t_2)p_{1,1}(x_2,t_2|x_3,t_3)p_1(x_3,t_3)$$

等号两端关于x_2积分，左端$p_3(x_1,t_1;x_2,t_2;x_3,t_3)=p_{1,1}(x_1,t_1|x_3,t_3)p_1(x_3,t_3)$，消去$p_1(x_3,t_3)$后得到

$$p_{1,1}(x_1,t_1|x_3,t_3)=\int p_{1,1}(x_1,t_1|x_2,t_2)p_{1,1}(x_2,t_2|x_3,t_3)\mathrm{d}x_2$$

称为 **Chapman-Kolmogorov 方程**，对于相当一般的离散和连续状态空间所有的 Markov 过程都成立因此对于特殊的过程没有提供多少新的信息。

现在研究在短时间间隔$t+s$的齐次过程，Chapman-Kolmogorov 方程写为

$$p_{1,1}(x,t+s|y,0)=\int p_{1,1}(x,t+s|z,t)p_{1,1}(z,t|y,0)\mathrm{d}z$$

假设当s小时，$p_{1,1}(x,t+s|y,t)$是$x-y$的尖峰函数。换言之，系统不会在短时间内改变它的状态，没有跳跃发生。只有x附近的z值对积分有贡献。因此取任意光滑函数$\phi(x)$在$x\to\pm\infty$时趋于 0，两端乘以上式对x积分。既然$\phi(x)$光滑且$p_{1,1}(x,s|y,0)$是窄范围的，可对$\phi(x)$关于z作 Taylor 展开

$$\phi(x)=\phi(z)+(x-z)\phi'(z)+\frac{1}{2}(x-z)^2\phi''(z)+\cdots$$

则

$$\int\phi(x)\,p_{1,1}(x,t+s|y,0)\mathrm{d}x=\int p_{1,1}(z,t|y,0)p_{1,1}(x,t+s|z,t)\times$$
$$\left[\phi(z)+(x-z)\phi'(z)+\frac{1}{2}(x-z)^2\phi''(z)+\cdots\right]\mathrm{d}z\mathrm{d}x$$

设积分顺序可以交换，则

$$\int p_{1,1}(x,s|z,0)\left[\phi(z)+(x-z)\phi'(z)+\frac{1}{2}(x-z)^2\phi''(z)+\cdots\right]\mathrm{d}x$$
$$=\phi(z)+\phi'(z)\int(x-z)p_{1,1}(x,s|z,0)\mathrm{d}x+\frac{1}{2}\phi''(z)\int(x-z)^2p_{1,1}(x,s|z,0)\mathrm{d}x+\cdots$$

设下列极限存在

$$A(x)=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\int(x-z)p_{1,1}(x,\Delta t|y,0)\mathrm{d}x$$
$$B(x)=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\int(x-z)^2p_{1,1}(x,\Delta t|y,0)\mathrm{d}x$$
$$0=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\int(x-z)^np_{1,1}(x,\Delta t|y,0)\mathrm{d}x\,,\quad n>2$$

注意第三个方程不是独立的假设，可从前俩个方程推导出来，从而

$$\int p_{1,1}(x,s|z,0)\left[\phi(z)+(x-z)\phi'(z)+\frac{1}{2}(x-z)^2\phi''(z)+\cdots\right]\mathrm{d}x$$
$$=\phi(z)+sA(z)\phi'(z)+\frac{1}{2}sB(z)\phi''(z)+o(s)$$

重排并分部积分

$$\int\frac{p_{1,1}(x,t+s|y,0)-p_{1,1}(x,t|y,0)}{s}\phi(x)\mathrm{d}x=$$
$$\int\phi(x)\left\{-\frac{\partial}{\partial x}\left[A(x)p_{1,1}(x,t|y,0)\right]+\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[B(x)p_{1,1}(x,t|y,0)\right]+o(1)\right\}\mathrm{d}x$$

令$s\to 0$，等式左端趋于$\partial p_{1,1}/\partial t$，右端$o(1)$项趋于 0。既然$\phi(x)$是任意光滑函数，可以得出

$$\frac{\partial p_{1,1}(x,t|y,0)}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial x}\left[A(x)p_{1,1}(x,t|y,0)\right]+\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[B(x)p_{1,1}(x,t|y,0)\right]$$

即 **Fokker-Planck 方程**(Fokker, 1914；Planck, 1917)，又称 Kolmogorov 第一方程。既然相对于较早时间求微商，称为反向 backwards 方程，其共轭方程称为向前 forward 方程.

在导出 Fokker-Planck 方程时，假设这一进程是齐次 Markov 过程，$p_{1,1}$是二阶连续可微的，其转移阶矩$A(x)$和$B(x)$都与时间差成正比。显然不是所有的 Markov 过程有这些属性，例如扩散过程。粗略一看，尚不清楚如何使用 Fokker-Planck 方程。它包含两个函数 $A(x)$和$B(x)$，其定义均取决于 $p_{1,1}$。然而它是$p_{1,1}$方程，看起来像一类扩散过程。实际源自 Chapman-Kolmogorov 方程的一个恒等式。然而还有一个考虑，使更多的恒等式。$A(x)$和$B(x)$仅仅取决于很小的时

间差，尤其是作为$\Delta t \to 0$。一旦使用此短时间信息计算$A(x)$和$B(x)$，就对所有的时间使用 Fokker-Planck 方程确定 $p_{1,1}$。

当$B(x)=0$时，得到经典力学中出现的 Liouville 方程

$$\frac{\partial p_{1,1}(x,t|y,0)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left[A(x)p_{1,1}(x,t|y,0)\right]$$

描写一个完全确定运动(deterministic motion)，即$z(y,t)$是普通常微分方程

$$\frac{\mathrm{d}z(t)}{\mathrm{d}t} = A[z(t),t],\quad z(y,t') = y$$

的解。则 Liouville 方程满足初始条件

$$p_{1,1}(x,0|y,0) = \delta(x-y)$$

的解是

$$p_{1,1}(x,t|y,0) = \delta\big(x - z(y,t)\big)$$

直接证明:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial x}\left[A(x)\delta\big(x-z(y,t)\big)\right] &= -\frac{\partial}{\partial x}\left[A\big(z(y,t),t\big)\delta\big(x-z(y,t)\big)\right] \\ &= -\left[A\big(z(y,t),t\big)\frac{\partial}{\partial x}\delta\big(x-z(y,t)\big)\right] \end{aligned}$$

和

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\delta\big(x-z(y,t)\big)\right] = -\frac{\partial}{\partial x}\left[\delta\big(x-z(y,t)\big)\right]\frac{\mathrm{d}z(y,t)}{\mathrm{d}t} = -A\big(z(y,t),t\big)\frac{\partial}{\partial x}\left[\delta\big(x-z(y,t)\big)\right]$$

因此，如果粒子在初始时刻0处于位置y，那么就保持在常微分方程确定的轨道上。

2.2 Wiener 过程

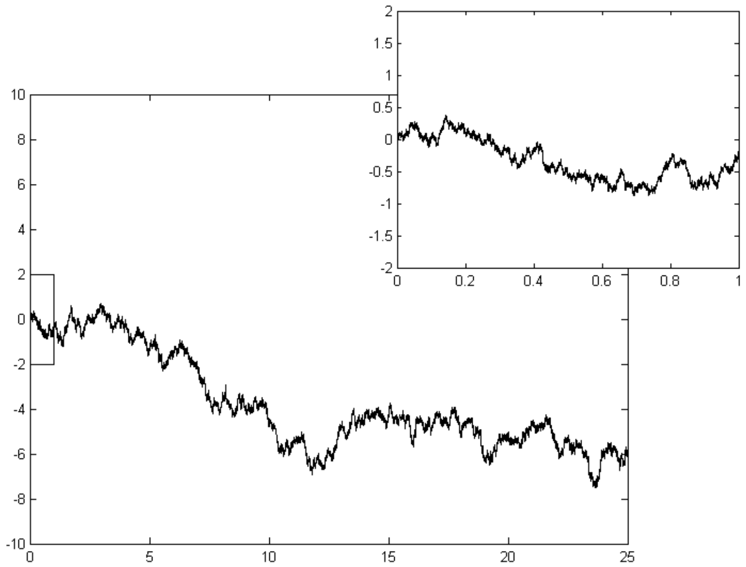
现在可以给出数学上 Brown 运动/物理上 Wiener 过程的定义：随机过程$B(\omega,t)$，$\omega \in \Omega$，$0 < t < 1$，满足下述公理：

(i) 对于一切的ω，$B(\omega,0)=0$;

(ii) 对于每一个固定的样本点ω，样本轨道$B(\omega,t)$是t的连续函数;

(iii) 对于每一个$0 < s \le t$，$B(\omega,t) - B(\omega,s)$是均值 0 和方差$t-s$正态随机变量；

(iv) $B(\omega,t)$有独立增量，即当$0 \le t_1 < t_2 < \cdots < t_n$时，对于$i = 1,2,\cdots,n$，增量$w(\omega,t_i) - w(\omega,t_{i-1})$是独立无关的。



A single realization of a one-dimensional Wiener process

Wiener 过程具有如下性质

$$E\big(B(\omega,t_1)B(\omega,t_2)\big) = \min(t_1,t_2)\text{，}\ (t_1,t_2) \ge 0$$

Wiener 过程的轨道具有很多奇特的性质[9]。$w(\omega,t)$的样本轨道是一类特殊的连续函数，处处不可微，在物理上就是说，粒子在每一瞬间受到介质中其它分子的碰撞，碰撞后的粒子立即改变运动方向，因而速度为无穷。从数学上说$B(\omega,t+\Delta t) - B(\omega,t) \sim N(0,\Delta t)$，即

$$\frac{B(\omega,t+\Delta t) - B(\omega,t)}{\sqrt{\Delta t}} \sim N(0,1)$$

对任意给定的正数C，有当$\Delta t \to 0$时

$$P\left(\omega{:}\left|\frac{B(\omega,t+\Delta t) - B(\omega,t)}{\Delta t}\right| \le C\right) = P\left(\omega{:}\left|\frac{B(\omega,\Delta t)}{\sqrt{\Delta t}}\right| \le C\sqrt{\Delta t}\right)$$

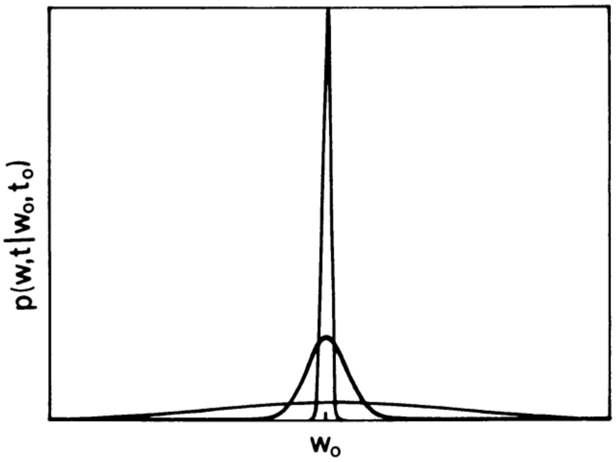
$$= \Phi\big(C\sqrt{\Delta t}\big) - \Phi\big(-C\sqrt{\Delta t}\big) \to 0$$

其中$\Phi(x)$是标准正态分布的分布函数

[9] 龚光鲁，随机微分方程及其应用概要，清华大学出版社，2007.

$$\Phi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{x}\mathrm{e}^{-\frac{s^2}{2}}\mathrm{d}s$$

由此可以说明 Brown 运动在任一点t_0处存在有限导数的几率为 0。经过严格论证，除了几率为零的轨道外，每条轨道上的任意点上，导数均不存在。



不可导函数的广义导数是可行的，$B(\omega,t)$的广义导数就是“白噪声”$R(\omega,t)$

$$\int_{t_1}^{t_2}R(\omega,t)\mathrm{d}t=B(\omega,t_2)-B(\omega,t_1)$$

形式上记为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}B(t)=R(t),\quad t\geq 0$$

真实含义是

$$B(t)=\int_0^t R(s)\mathrm{d}s\,,\quad B(t)=0$$

上式右端为均方积分，也可以作 Wigner 过程的定义式。

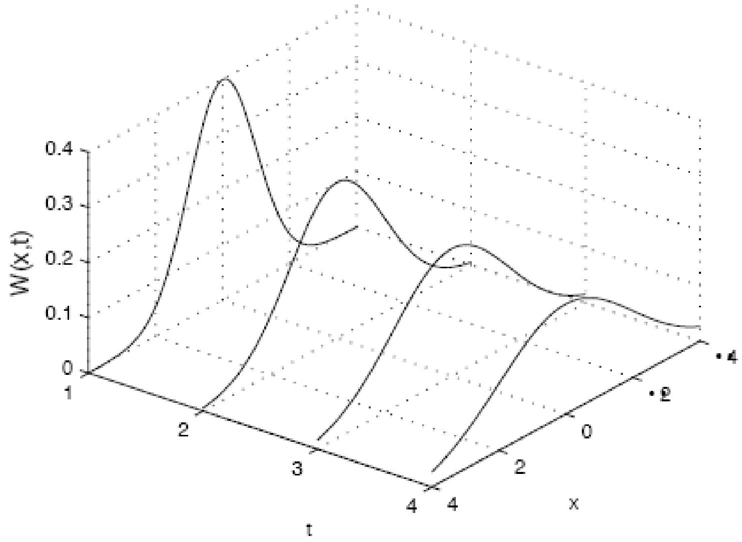
现在考察时间向前演化的 Wiener 过程与相关随机过程的关系。设对于若干个t值，作为随机变数ω的函数的随机变数$B(\omega,t)$，定义函数

$$W(x,t)\mathrm{d}x=P(x\leq B(t)\leq x+\mathrm{d}x)$$

其中$w(t)$是 Wiener 过程，$W(x,t)$是固定时刻t的 Wiener 过程$B(t)$几率分布密度

$$W(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi t}}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2t}}$$

如图所示：



可以看到，随着t的增加，$W(x,t)$的图形变得越来平坦。Wiener 过程增量是独立，意味着如果已知时刻t, $w(t)$位于 x, 那么在时刻$t+\Delta t$的位置与时刻t的位置无关, $W(x,t)$与$W(x,t+\Delta t)$的关系就是 Chapman-Kolmogorov 方程

$$W(x,t+\Delta t)=\int_{-\infty}^{+\infty}W(x+y,t)\Psi(x,y,\Delta t)\mathrm{d}y$$

其中

$$\Psi(x,y,\Delta t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta t}}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\Delta t}}$$

是转移核

$$W(x+y,t)=W(x,t)+yW_x(x,t)+\frac{y^2}{2}W_{xx}(x,t)+\frac{y^3}{2\cdot 3}W_{xxx}(x,t)+O(y^4)$$

得到

$$\frac{\partial W}{\partial t}=\frac{1}{2}\frac{\partial^2 W}{\partial x^2}$$

对于 Langevin 方程，白噪声随机力

$$F(t)=m\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}B(t)\ \sim\ B(t)=\frac{1}{m}\int_0^t F(s)\mathrm{d}s$$

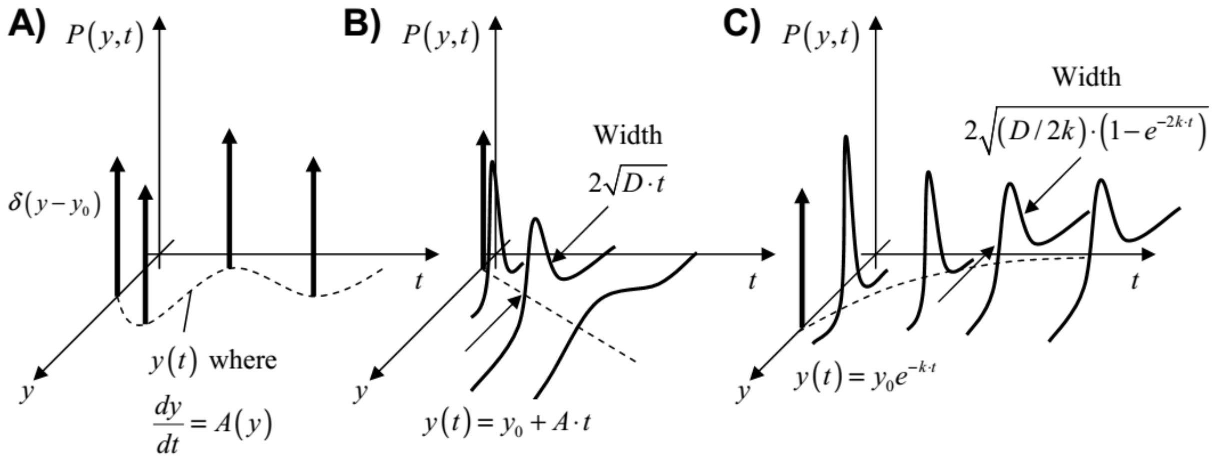
因此

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t) = -\beta U(t) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}B(t)$$

来说，探讨随机变量$u(t)$的几率密度函数满足的规律。可以证明，对应于 Langevin 方程解的 Fokker-Planck 方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}W(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}[\beta x W(x,t)] + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}W(x,t)$$

在 Wiener 过程的 Fokker-Planck 方程中增加线性漂移项。



Some solutions of the Fokker-Planck equation. A) Liouville equation. B) Wiener process. C) Ornstein-Uhlenbeck process.

2.3 随机积分

为了解释 Langevin 方程，重写为

$$\mathrm{d}U(t) = -\beta U(t)\mathrm{d}t + \mathrm{d}B(t)$$

尝试着给出微分的意义。在 Wiener 积分意义上，对于微分等式两端同时乘以t的连续函数$f(t)$，做求平均$\langle\cdot\rangle$的积分，对于所有的$t\in[0,T]$及其连续函数$f(t)$成立

$$\int_0^T f(t)\mathrm{d}U(t) = -\beta\int_0^T f(t)\,U(t)\mathrm{d}t + \int_0^T f(t)\,\mathrm{d}B(t)$$

注意，第二个积分不是普通的，称为随机积分(stochastic integral)，需要作进一步研究。

对于定义在闭区间$[0,T]$上的函数$f(t)$，如果区间$[0,T]$有划分(partition)

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_n = T$$

则函数$f(t)$在区间$[0,T]$上的总变差(Variation)

$$\text{Variation}\big(f(t)\big) = \sup_{\text{all partitions}} \sum_{i=0}^{n-1} |f(t_{i+1}) - f(t_i)|$$

有限时，就称$f(t)$是有界变差的。Stieltjes 积分

$$\int_0^T g(s)\,\mathrm{d}f(s)$$

仅当增量函数$f(s)$是有界变差时才有意义。既然 Wiener 过程的导数几乎处处不存在，因此却是无界变差的，导致

$$\int_0^T f(t)\,\mathrm{d}B(t)$$

不是 Stieltjes 积分。

然而，对于连续可微函数$f(t)$，利用分部积分公式，仍然可以定义$f(t)$对 Wiener 过程的 Paley-Wiener-Zygmund 积分

$$\int_0^T f(t)\,\mathrm{d}B(t) = [f(T)B(T) - f(0)B(0)] - \int_0^T f'(t)\,B(t)\mathrm{d}t$$

这是一个随机变量，的确可以认为是按轨道积分的，除了满足线性性质之外，还有性质

$$\left\langle \int_0^T f(t)\,\mathrm{d}B(t) \right\rangle = 0,\quad \left\langle \left[\int_0^T f(t)\,\mathrm{d}B(t)\right]^2 \right\rangle = \int_0^T |f(t)|^2\,\mathrm{d}t$$

但是对于导数$f'(t)$不存在的函数，如此定义还是有启发性的。

当$f(t) = 1$时，就有

$$U(T) - U(0) = -\beta \int_0^T U(t)\mathrm{d}t + B(T) - B(0)$$

设T远比碰撞时间间隔要长得多，对于$0 = a < t_1 < \cdots < t_n = T$而言，$B(T) - B(0)$可以表示为

$$B(T) - B(0) = \sum_{k=0}^{n-1} [B(t_{k+1}) - B(t_k)]$$

至此，Langevin 方程右端第二项$\mathrm{d}W(t)$可以解释为 **Wiener 过程**，写为

$$\dot{U}(t) = -\beta U(t) + \dot{B}(t)$$

总是解释为积分方程

$$U(T) - U(0) = -\beta \int_0^T U(t)\mathrm{d}t + B(T) - B(0)$$

再令$f(t) = \mathrm{e}^{\beta t}$，得到

$$\int_0^t \mathrm{e}^{\beta s}\mathrm{d}U(s) = -\beta \int_0^t \mathrm{e}^{\beta s}\, U(s)\mathrm{d}s + \int_0^t \mathrm{e}^{\beta s}\, \mathrm{d}B(s)$$

分部积分是可行的，有

$$U(t)\mathrm{e}^{\beta t} - U(0) = \int_0^t \mathrm{e}^{\beta s}\, \mathrm{d}B(s)$$

即

$$U(t) = U(0)\mathrm{e}^{-\beta t} + \int_0^t \mathrm{e}^{-\beta(t-s)}\, \mathrm{d}B(s)$$

这就是线性 Langevin 方程的 Doobs 解释。

1923 年，Wiener 把 Brown 运动作为随机过程给予严格的处理，过程的采样函数$X(t)$是几率为 1 的连续的，对于小t，$\{X(s+t) - X(t)\}$的分布是正确的，而$\{X(s+t) - X(t)\}$的标准方差是$\sim |t|^{1/2}$的，因此$\{X(s+t) - X(t)\}$是$|t|^{1/2}$数量级的，意味着导数$\mathrm{d}X(s)/\mathrm{d}s$不能是有限的，换言之 Einstein-Smoluchowski 结论必需修正。

§3 随机微分方程

随机积分在应用中往往是在Stratonovich微积分意义的。此微积分的设计其基本的规则与标准微积分中的相同，如链规则和分部积分法。虽然操作的规则是相同的结论仍是非常不同的。Stratonovich 随机积分可以约化到 Itō 积分，数学上的标准的随机微分方程理论可以用于Stratonovich 随机微分方程。此外，Stratonovich 积分更适合的随机微积分在流形上的推广。很少随机积分可以解析形式解决的，随机数值积分因此是随机积分应用的重要问题。各种数值逼近收敛到 Stratonovich 积分，使其在随机微分方程中有重要地位。但是，最广泛使用的 Langevin 方程数值解的 Eule 格式却要求使用最广泛要求 Itō 形式的方程。

3.1 非线性 Langevin 方程

考虑一般的随机微分方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}X(t)=h[X(t),t]+g[X(t),t]R(t)$$

其中

$$\overline{R(t)}=0,\quad \overline{R(t)R(t')}=2D\delta(t-t')$$

噪声$R(t)$的每个δ函数跳跃引起$U(t)$的跳跃。这是多重噪声的非线性 Langevin 方程，它可能是一个非线性方程，并据说有乘性噪声(multiplicative noise)，因涨落力量$R(t)$是乘以未知量的函数$U(t)$。相比之下，Langevin 方程有加性噪声(additive noise)，因为涨落系数与未知量无关。如前所述，形式上

$$R(t)=\frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}t}$$

其中记号$\mathrm{d}W(t)=R(t)\mathrm{d}t$，$B(\omega,t)$是 Wiener 过程，增量

$$B(\omega,t)=B(\omega,t+\Delta t)-B(\omega,t)$$

是齐次和正态的。

非线性 Langevin 方程必须解释为积分方程

$$X(t)-X(0)=\int_0^t h[s,X(s)]\mathrm{d}s+\int_0^t g[s,X(s)]\mathrm{d}B$$

第一个积分是通常意义的，第二个积分是关于随机函数关于 Wiener 过程的积分。使得随机积分有意义的办法就是用分片常数函数近似$g[s,X(s)]$，即

$$\int_0^t g[s,X(s)]\mathrm{d}B\approx\sum_{i=0}^{n-1} g_i[s,X(s)]\,\mathrm{d}B_i=\sum_{i=0}^{n-1} g_i[s,X(s)]\,[B(t_{i+1})-B(t_i)],\quad s\in[t_{i+1},t_i]$$

其中$\{t_i\}_{i=0}^{n}$是区间$[0,t]$的一个划分，然后考虑当区间t_i-t_{i-1}的最大值趋于 0 时和式的极限。$g_i[s,U(s)]$，$s\in[t_{i+1},t_i]$的取值有两种选择：

(i) 在区间左端点t_i取值

$$g_i[s,X(s)]=G[t_i,X(t_i)]$$

相应的随机积分

$$\int_0^t g[s,X(s,\omega)]\mathrm{d}B(\omega,t)$$

称为 Itô 积分；

(i) 在区间端点取值求平均

$$g_i[s,X(s)]=\frac{g[t_i,X(t_i)]+g[t_{i+1},X(t_{i+1})]}{2}$$

相应的随机积分

$$\int_0^t g[s,X(\omega,s)]\circ\mathrm{d}B(\omega,t)$$

称为 Stratonovich 积分。

例 3. 设$g[t,B(t)]=B(t)$，则在 Itô 情形

$$
\begin{aligned}
I_1 &= \int_0^t B(s)\mathrm{d}B \approx \sum_{i=0}^{n-1} W(t_i)\,[W(t_{i+1}) - B(t_i)] \\
&= -\sum_{i=1}^{n-1} B_i(B_i - B_{i+1}) \\
&= -[B_0^2 - B_0B_1 + B_0^2 - B_0B_1 + \cdots + B_{n-1}^2 - B_{n-1}B_n] \\
&= -\frac{1}{2}\left[B_0^2 + \sum_{i=1}^{n-1} B_i(B_{i+1} - B_i)^2 - B_n^2\right] = \frac{1}{2}(B_t^2 - B_0^2) - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n-1}|\Delta B_i|^2
\end{aligned}
$$

其中$\Delta B_i = B_{i+1} - B_i$。这也是随机变量，期望值

$$E[I_1] = 0$$

相形之下，Stratonovich 情形

$$
\begin{aligned}
I_2 &= \int_0^t B(s)\circ \mathrm{d}B \approx \sum_{i=0}^{n-1}\frac{1}{2}[B(t_{i+1}) + B(t_i)]\,[B(t_{i+1}) - B(t_i)] \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i=0}^{n-1}[B^2(t_{i+1}) - B^2(t_i)] \\
&= \frac{1}{2}[B^2(t_1) - B^2(t_0) + B^2(t_2) - B^2(t_1) + \cdots + B^2(t_n) - B^2(t_{n-1})] \\
&= \frac{1}{2}[B^2(t_n) - B^2(t_0)] = \frac{1}{2}B^2(t)
\end{aligned}
$$

期望值

$$E[I_2] = \frac{t}{2}$$

两种积分的期望值如此不同足以说明积分本身的不同。这与积分值与 Riemann 和的点的选择无关普通积分完全不一样。随机积分如何求就决定了随机微分方程的含义的巨大差别。

应用迭代程序消去随机变量$U(t)$

$$
\begin{aligned}
\langle X(t+\Delta t) - X(t)\rangle &= \left\langle \int_t^{t+\Delta t} h[s, X(s)]\mathrm{d}s \right\rangle + \left\langle \int_t^{t+\Delta t} g[s, X(s)]\mathrm{d}B(s) \right\rangle \\
&= h(x, t+\Theta_1\Delta t)\Delta t + g(x, t+\Theta_2\Theta_3\Delta t)\frac{\partial}{\partial x}g(x, t+\Theta_3\Delta t)\left\langle \int_0^{\Delta t} B(s)\mathrm{d}B(s)\right\rangle + o(\Delta t)
\end{aligned}
$$

此处$\Theta_i \le 1$，对其中随机积分，按 Itô 解释和 Stratonovich 解释分别有

$$\text{Itô:}\ \ \langle g(t,X)R(t)\rangle = 0$$

$$\text{Stratonovich:}\ \ \langle g(t,X)R(t)\rangle = Dg(x,t)\frac{\partial}{\partial x}g(x,t)$$

Stratonovich 解导致感生噪声(noise induced)或虚假漂移(spurious drift)的概念。

$$\langle g(t,X)R(t)\rangle \neq 0$$

因此按 Stratonovich 解释的平均化非线性 Langevin 方程与按 Ito 解释的不同。为了保证观测量x的一致，必须使用 Stratonovich 方程与 Ito 方程之间的转换规则。简言之， 对每个微分方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}X(t) = h[t,X(t)] + g[t,X(t)]\frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}t}$$

按 Stratonovich 积分

$$X(t) = X(0) + \int_0^t h[s,X(s)]\mathrm{d}s + \int_0^t g[s,X(s)]\circ \mathrm{d}B(s)$$

按 Itô 积分

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}X(t) = X(0) + + \int_0^t h[s,X(s)]\mathrm{d}s + \underline{D\int_0^t g[X(s),s]\frac{\partial}{\partial X}g[X(s),s]\,\mathrm{d}s} + \int_0^t g[s,X(s)]\,\mathrm{d}B(s)$$

例. Ornstein-Uhlenbeck 过程。$U(t)$按 Stratonovich 解释为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t) + \beta U(t) = \frac{1}{m}F(t)$$

其中$F(t)$是系数$D = m\beta kT$的白噪声，求的n阶速度矩$\langle U^n(t)\rangle$。两端乘以$nU^{n-1}(t)$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^n(t) + n\beta U^n(t) = \frac{1}{m}nU^{n-1}(t)F(t)$$

解释为$X(t) = U^n(t)$的随机微分方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}X(t) + n\beta X(t) = \frac{1}{m}nX^{n-1/n}(t)F(t)$$

包含乘性噪声$g(X) = nX^{n-1/n}(t)/m$，依据 Stratonovich 规则

$$\begin{aligned}\langle\frac{1}{m}nX^{n-1/n}(t)R(t)\rangle &= \beta\frac{kT}{m}n^2x^{n-1/n}\frac{\partial}{\partial x}x^{n-1/n}\\ &= \beta\frac{kT}{m}(n-1)nx^{n-1/n}\frac{\partial}{\partial x}x^{n-1/n} = \beta\frac{kT}{m}(n-1)n\langle U^{n-2}(t)\rangle\end{aligned}$$

因此

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle U^n(t)\rangle+n\beta\langle U^n(t)\rangle=\beta\frac{kT}{m}(n-1)n\langle U^{n-2}(t)\rangle$$

当$n=2$时，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle U^2(t)\rangle+n\beta\langle U^2(t)\rangle=2\beta\frac{kT}{m}$$

解得

$$\langle U^2(t)\rangle=\left[v^2(0)-\frac{kT}{m}\right]e^{-2\beta t}+\frac{kT}{m}$$

与次类推，可以求得所有速度矩。

相应的 Itô 方程为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^n(t)=-n\beta\left[U^n(t)-\frac{kT}{m}(n-1)U^{n-2}(t)\right]+\frac{1}{m}nU^{n-1}(t)F(t)$$

其中乘性噪声必须应用 Ito 微积分

$$\langle U^{n-1}(t)F(t)\rangle=0$$

才能得到相同速度矩。

按照 Itô 解释，设随机过程$X_t=X(t)$由方程

$$\mathrm{d}X_t=u\mathrm{d}t+v\mathrm{d}B_t$$

对于二阶连续可微函数$g(t,x)$而言，随机过程

$$Y_t=g(t,X_t)$$

满足

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

其中$(\mathrm{d}X_t)^2=\mathrm{d}X_t\cdot\mathrm{d}X_t$与规则

$$\mathrm{d}t\cdot\mathrm{d}t=\mathrm{d}t\cdot\mathrm{d}B_t=\mathrm{d}B_t\cdot\mathrm{d}t=0,\ \mathrm{d}B_t\cdot\mathrm{d}B_t=\mathrm{d}t$$

相容。称为 1 维 Itô 公式。

3.2 Feynman-Kac 公式

研究为某些二阶线性抛物微分方程解的一个称为 Feynman-Kac 公式的随机表示公式。物理学家 Richard Feynman (1918-1988)和数学家 Mark Kac (1914-1984)的名字命名。可以将 Feynman-Kac 公式作为扩散方程解的卷积公式的推广，其把扩散方程的解表示为正态随机变量的数学期望。首先给出扩散方程差分近似的叙述方法，直观且具有启发性。然后推广到 Feynman-Kac 问题。如前所述，对于一维瞬时源扩散问题

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{1}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad u(x,0)=\phi(x)$$

其中$-\infty<x<+\infty$，$t>0$，有解

$$u(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}G(x',t)\phi(x+x')\mathrm{d}x', \quad G(x',t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2t}}$$

既然$G(x',t)$也是零均值方差t的随机变数$\eta(\omega)$的几率分布函数，因此

$$u(x,t)=E\big[\phi\big(x+\eta(\omega)\big)\big]$$

如果随机过程$W(\omega,t)$是 Wiener 过程，则对于固定t的而言，是零平均方差为t的正态分布

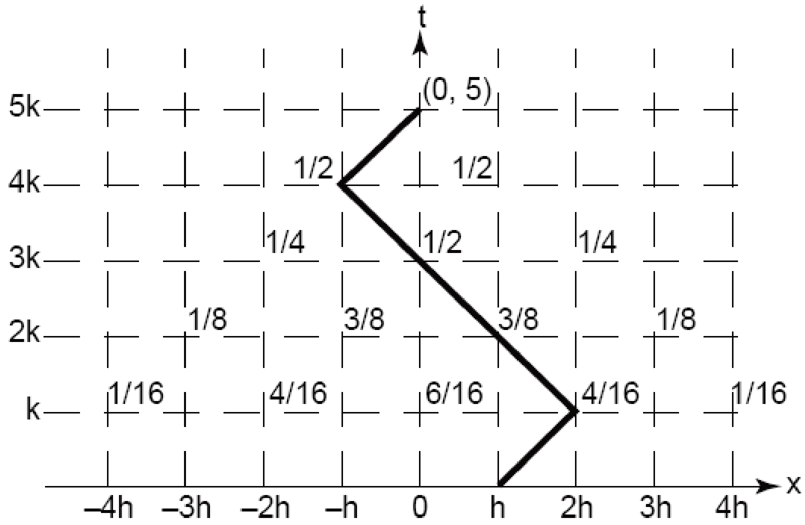
$$u(x,t)=E\big[\phi\big(x+W(\omega,t)\big)\big]$$

如图，在(x,t)平面上构造网格，$u(ih,nk)\sim V_i^n$，扩散方程的时间向前空间中心差分格式

$$\frac{V_i^{n+1}-V_i^n}{k}=\frac{1}{2}\frac{V_{i+1}^n+V_{i-1}^n-2V_i^n}{h^2}$$

从初值$V_i^0=\phi(ih)$出发，得到递推关系

$$V_i^{n+1}=V_i^n+\lambda(V_{i+1}^n+V_{i-1}^n-2V_i^n)=(1-2\lambda)V_i^n+\lambda V_{i+1}^n+\lambda V_{i-1}^n$$



如前所述，当网格比

$$\lambda = \frac{k}{2h^2} \le \frac{1}{2}$$

时，差分近似是收敛的。取$\lambda = 1/2$，则

$$V_i^{n+1} = \frac{1}{2}(V_{i+1}^n + V_{i-1}^n)$$

则可以将v_i^n与初值$V_i^0 = \phi(ih)$联系起来

$$V_i^n = \frac{1}{2}(V_{i+1}^{n-1} + V_{i-1}^{n-1}) = \frac{1}{4}V_{i-2}^{n-2} + \frac{2}{4}V_i^{n-2} + \frac{1}{4}V_{i+2}^{n-2} \cdots = \sum_{j=0}^{n} C_{j,n}\phi[(-n+2j+i)h]$$

其中$C_{j,n}$与可以用二项式系数$\binom{n}{j}$表示

$$C_{j,n} = \frac{1}{2^2}\binom{n}{j}$$

因此

$$V_i^n = \sum_{j=0}^{n} \frac{1}{2^2}\binom{n}{j}\phi[(-n+2j+i)h]$$

对于系数$C_{j,n}$可作解释：一个醉汉从点(ih, nk)出发，向左或者向右移动步长h，几率相同均为$1/2$；假设每步之间是独立无关的，移动n步后到达点$\big((-n+2j+i)h, 0\big)$的几率就是$C_{j,n}$。因此可以把醉汉的移动表示为n个随机变量

$$\eta_k=\begin{cases}h, & \text{几率 } 1/2\\ -h, & \text{几率 } 1/2\end{cases},\quad k=1,2,\cdots,n$$

之和，从而给出系数$C_{j,n}$的另一种表示

$$C_{j,n}=P\left(\sum_{k=1}^{n}\eta_k=(-n+2j)h\right)$$

根据概率论中心极限定理，当$n\to\infty$时，随机变量和$\sum_{k=1}^{n}\eta_k$趋于零均值方差nh^2的正态分布。

既然$\lambda=1/2$，则$h^2=k$，即有$nh^2=nk=t$。换言之，当$n\to\infty$，$h\to 0$时，随机变量和$\sum_{k=1}^{n}\eta_k$趋于零均值方差t的正态分布

$$P\left(\sum_{k=1}^{n}\eta_k=(-n+2j)h\right)\sim\frac{1}{\sqrt{2\pi t}}\mathrm{e}^{-\frac{(x')^2}{2t}}\cdot 2h$$

其中$x'=(-n+2j)h$。至此，当$n\to\infty$时，

$$V_i^n=\sum_{j=0}^{n}C_{j,n}\phi[(-n+2j+i)h]\quad\to u(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi t}}\mathrm{e}^{-\frac{s^2}{2t}}\phi(s)\mathrm{d}s$$

运用中心极限定理导出了扩散方程的解。

其次，在量子力学中，研究有位势$U(x)$的扩散方程的 Cauchy 问题

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{1}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+U(x)u,\quad u(x,0)=\phi(x)$$

如前近似，取$\lambda=1/2$，则

$$V_i^{n+1}=\frac{1}{2}(V_{i+1}^n+V_{i-1}^n)+\frac{k}{2}(U_{i+1}V_{i+1}^n+U_{i-1}V_{i-1}^n)=\frac{1}{2}(1+kU_{i+1})V_{i+1}^n+\frac{1}{2}(1+kU_{i-1})V_{i-1}^n$$

将V_i^n与初值$V_i^0=\phi(ih)$联系起来

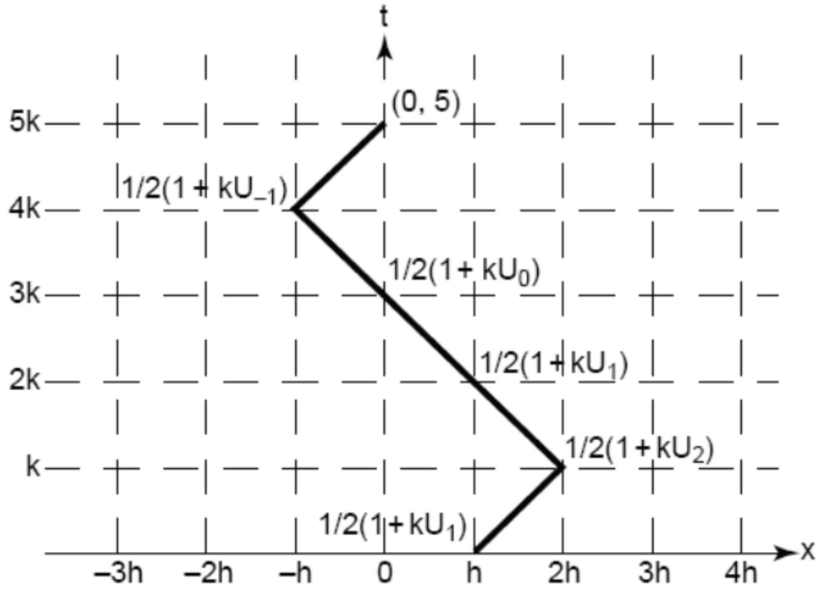
$$V_i^n=\sum_{\ell_1=\pm1,\cdots,\ell_n=\pm1,}^{n}\frac{1}{2^2}\left(1+kU_{i+\ell_1}\right)\left(1+kU_{i+\ell_1+\ell_2}\right)\cdots\left(1+kU_{i+\ell_1+\cdots+\ell_n}\right)V_{i+\ell_1+\cdots+\ell_n}^0$$

与$U(x)=0$的纯扩散问题不同，每次向左或向右的移动不仅是因子$1/2$而是$\big(1+kU(x)\big)/2$，每种选择$\ell_1,\ell_2,\cdots\ell_n$对应与路径(path)，可以将点

$$(ih,nk),\ (ih+\ell_1 h,(n-1)k),\ \cdots,\ (ih+\ell_1 h+\cdots+\ell_n h,0)$$

联系起来，如图所示。设$\{\eta_m\}$是几率

$$P\{\eta_m = h\} = P\{\eta_m = -h\} = 1/2$$



独立随机变量的集合，由于

$$P\{\eta_1 = \ell_1 h, \cdots, \eta_n = \ell_n h\} = \frac{1}{2^n}$$

因此

$$V_i^n = E_{\text{all paths}}\left\{\phi(ih + \eta_1 + \cdots + \eta_n)\prod_{m=1}^{n}\left(1 + kU(ih + \eta_1 + \cdots + \eta_m)\right)\right\}$$

用线性内插刻画随机路径，记$ih, t_n = nk$和$s_m = mh$，若$s_{m-1} \le s \le s_m$，则

$$\widetilde{w}(s) = \eta_1 + \cdots + \eta_{m-1} + \frac{s - s_{m-1}}{k}\eta_m$$

对于时刻$0 \le s \le t$而言，每条起始于$(x,t) = (ih, nk)$的路径则具有形式$(x + \widetilde{w}(s), t - s)$，且

$$V_i^n = E_{\substack{\text{all broken}\\ \text{line paths}}}\left\{\phi\big(x + \widetilde{w}(t)\big)\prod_{m=1}^{n}\Big(1 + kU\big(x + \widetilde{w}(s_m)\big)\Big)\right\}$$

如果$k|U| < 1/2$，则$1 + kU = \exp(kU + \epsilon)$，其中$|\epsilon| \le Ck^2$，因此

$$\prod_{m=1}^{n}\Big(1 + kU\big(x + \widetilde{w}(s_m)\big)\Big) = \exp\left(k\sum_{m=1}^{n} U\big(x + \widetilde{w}(s_m)\big) + \epsilon'\right)$$

其中$|\epsilon'| \le nCk^2 = Ctk$。由于 Riemann 和与积分

$$k\sum_{m=1}^{n}U\big(x+\widetilde{w}(s_m)\big)\quad\sim\quad\int_0^t U\big(x+\widetilde{w}(s)\big)\mathrm{d}s$$

对应关系，

$$V_i^n=E_{\substack{\text{all broken}\\ \text{line paths}}}\left\{\mathrm{e}^{\int_0^t U(x+\widetilde{w}(s))\mathrm{d}s}\phi\big(x+\widetilde{w}(t)\big)\right\}+\text{small terms}$$

当$h,k\to 0$，all broken line paths 越来越像 Brown 运动路径$x+w(s)$，因此

$$u(x,t)=E_{\substack{\text{all broken}\\ \text{line paths}}}\left\{\mathrm{e}^{\int_0^t U(x+w(s))\mathrm{d}s}\phi\big(x+w(t)\big)\right\}=\int \mathrm{e}^{\int_0^t U(x+w(s))\mathrm{d}s}\phi\big(x+w(t)\big)\mathrm{d}W$$

这就 **Feynman-Kac** 公式。

按物理学习惯，可以重新表示为

$$u(x,t)=\frac{1}{Z}\int\exp\left[-\int_0^t\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}s}\right)^2-U\big(x+w(s)\big)\mathrm{d}s\right]\phi\big(x+w(t)\big)[\mathrm{d}w]$$

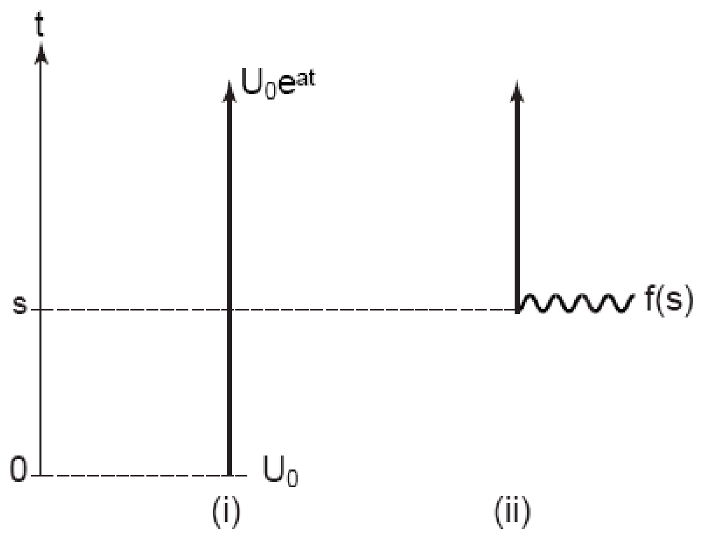
这是对“所有的路径求和”，因此[dw]常常表示为d*path*。

考虑常微分方程初值问题

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}=au+f(t),\quad u(0)=u_0$$

有解

$$u(t)=u_0\mathrm{e}^{at}+\int_0^t f(s)\mathrm{e}^{a(t-s)}\mathrm{d}s$$



其中，函数e^{at}是$u_0=1$和$f(t)=0$的解，称为传播子(propagator)；第一项u_0e^{at}描写初值u_0借助传播子随时间的传播，如图(i)所示；第二项与初值无关，描写在时刻s开始的外力$f(s)$的作用。

把上述图示方法推广到位势摄动$\epsilon U\big(x+w(s)\big)$的扩散方程。展开

$$\exp\int_0^t \epsilon U\big(x+w(s)\big)\mathrm{d}s = 1+\epsilon\left[\int_0^t U\big(x+w(s)\big)\mathrm{d}s\right]+\frac{1}{2}\epsilon^2\left[\int_0^t U\big(x+w(s)\big)\mathrm{d}s\right]^2+\cdots$$

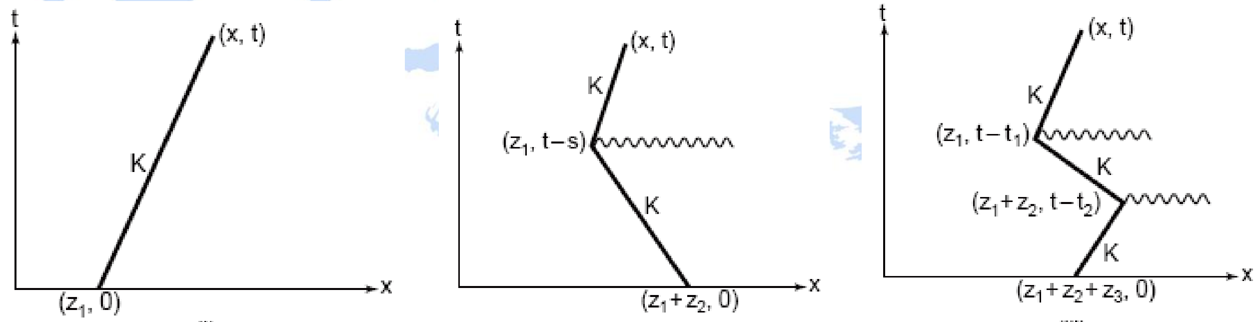
代入解的 Wiener 积分表示，记

$$K(z,s)=\frac{1}{\sqrt{2\pi s}}\mathrm{e}^{-z^2/2s}$$

因此，第一项为当$U=0$时，得到

$$T_0=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi t}}\mathrm{e}^{-y^2/2t}\phi(x+y)\,\mathrm{d}y=\int_{-\infty}^{\infty}K(x-z,t)\phi(z)\,\mathrm{d}z$$

因此$K(z,s)$就是传播子，T_0可以如图(i)表示，称为 Feynman 图。第二项



(i) (ii) (iii)

3.3 Newton 位势

设$\{X(t)=X_1(t),X_2(t),\cdots,X_n(t)\}$是取值在$\mathbb{R}^n$的随机过程，若满足：

(i)对$\forall 0\le t_1<t_2<\cdots<t_m$，$X(t_1)-X(0)$，$X(t_2)-X(t_1)$，$\cdots$，$X(t_m)-X(t_{m-1})$相互独立的；

(ii)对$\forall s\ge 0$，$t>0$，增量$X(t+s)-X(s)$为n维正态分布，其概率密度函数为

$$p(t;x)=\frac{1}{(2\pi t)^{n/2}}\mathrm{e}^{-\frac{|x|^2}{2t}},\quad x\in\mathbb{R}^n$$

其中

$$|x| = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^{1/2}$$

(iii) 对每一个$\omega \in \Omega$，$X(\omega,t)$是t的连续函数；

则称$\{X(t), t \geq 0\}$为n维 Brown 运动（Wiener 过程）。

简记$X(t)$为X_t，设初始分布$\mu(A) = p(X(0) \in A)$，其中$A \subset \mathbb{R}^n$，由增量$X(t+s) - X(s)$的概率密度函数，可求$X(t)$的概率密度函数

$$p(X(t) \in A) = \int_A \left\{\int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{(2\pi t)^{n/2}} \mathrm{e}^{-\frac{|x-z|^2}{2t}} \mu \mathrm{d}x\right\} \mathrm{d}z$$

为了突出μ的作用，有时记为 $p_\mu(X(t) \in A)$。转移概率密度记为

$$p(t; x, z) = \frac{1}{(2\pi t)^{n/2}} \mathrm{e}^{-\frac{|x-z|^2}{2t}}$$

其中$t \geq 0$，$x, z \in \mathbb{R}^n$，$n \geq 1$。

若$X(0) = x \in \mathbb{R}^n$固定，或者说$\mu$集中在单点集$x$上，记$p_\mu = p_x$，则

$$p_x(X(t) \in A) = \int_A p(t; x, z)\, \mathrm{d}z$$

$p(t; x, z)$的解释是，作 Brwon 运动的粒子从x出发于时刻t转移到z附近的概率密度，显然关于x, z是对称的。

对时间t积分，得到 Brown 运动与 Newton 位势之间的重要关系

$$g(x, z) = \int_0^\infty p(t; x, z) \mathrm{d}t = \begin{cases} \dfrac{\Gamma(n/2 - 1)}{(2\pi t)^{n/2}} \dfrac{1}{|x - z|^{n-2}}, & n \geq 3 \\ \infty, & n \leq 2 \end{cases}$$

其中

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty y^{\alpha-1} \mathrm{e}^{-y} \mathrm{d}y$$

任给$s > 0$，有

$$\int_0^s p(t;x,z)\mathrm{d}t = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_0^s \frac{1}{t^{n/2}}\mathrm{e}^{-\frac{|x-z|^2}{2t}}\mathrm{d}t$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_\infty^{|x-z|^2/2s} \frac{(2u)^{n/2}}{|x-z|^n}\mathrm{e}^{-y}\frac{|x-z|^2}{2}\left(-\frac{1}{y^2}\right)\mathrm{d}y$$
$$= \frac{1}{2\pi^{n/2}}|x-z|^{2-n}\int_{|x-z|^2/2s}^{\infty} y^{n/2-2}\mathrm{e}^{-y}\,\mathrm{d}y$$

当且仅当$n/2-1\geq 0$，即$n\geq 3$时

$$\lim_{s\to\infty}\frac{1}{2\pi^{n/2}}\int_{|x-z|^2/2s}^{\infty} u^{(n/2-1)-1}\mathrm{e}^{-y}\mathrm{d}y = \frac{\Gamma(n/2-1)}{2(\pi)^{n/2}}$$

即得

$$\int_0^\infty p(t;x,z)\mathrm{d}t = \begin{cases}\dfrac{\Gamma(n/2-1)}{2\pi^{n/2}}\dfrac{1}{|x-z|^{n-2}}, & n\geq 3\\ \infty, & n\leq 2\end{cases}$$

在$\mathbb{R}^n$中，对于$r>0$，引入球$B(r)$和球面$S(r)$

$$B(r)=\left\{x\colon |x|\leq r,\ x\in\mathbb{R}^n\right\},\ S(r)=\left\{x\colon |x|=r,\ x\in\mathbb{R}^n\right\}$$

可以求的球$B(r)$的体积

$$|B(r)| = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)}\int_0^r s^{n-1}\mathrm{d}s = \frac{\pi^{n/2}r^n}{\Gamma(n/2+1)}$$

对上式微分，得到球面$S(r)$面积

$$|S(r)| = \frac{2\pi^{n/2}r^{n-1}}{\Gamma(n/2)}$$

因此有

$$\int_0^\infty p(t;x,z)\mathrm{d}t = \begin{cases}\dfrac{2}{(n-2)S(1)}\dfrac{1}{|x-z|^{n-2}}, & n\geq 3\\ \infty, & n\leq 2\end{cases}$$

提供了两个大的东西之间的重要联系。在一端看到 Newton-Coulomb 位势；在另一端也称为是 De Moivre-Laplace-Gauss 分布，（别名"误差函数"）的正态概率密度。$g(x,y)$的直观意义就是从x出发经历时间后转移到z附近的概率密度。

在$\mathbb{R}^3$中，设在z点放置一个点电荷q，则在点x处产生的电位势等于将一个单位电荷从无穷

远处移动到x点处所作功，电位势取值为

$$\frac{q}{2\pi|x-z|}$$

而将在$z_i(i=1,2,\cdots,m)$点放置m个点电荷q，可以视为离散点电荷分布，则m个点电荷在点x处产生的电位势

$$\frac{1}{2\pi}\sum_{i=1}^{m}\frac{q_m}{|x-z_i|}$$

一般地，现设电荷按一测度$\mu(z)$分布，它表示在$(z,z+\mathrm{d}z)$上有电荷$\mathrm{d}\mu(z)$. 定义由$\mu(z)$在sx点产生的电位势为

$$G\mu(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}^3}\frac{\mathrm{d}\mu(z)}{|x-z|}$$

.从分析的观点看，上式定义了一个积分变换G，把测度μ变换为$G\mu$. 积分变换核

$$\frac{1}{2\pi}\frac{1}{|x-z|}$$

恰好是 3 维 Brown 运动转移概率密度对时间t的积分$g(x,z)$。这正是 Brown 运动与 New 位势联系起来的纽带之一。

对于$\mathbb{R}^n$上的连续函数$f(x)$，变换

$$P_tf(x)=\int_{\mathbb{R}^n}f(z)p(t;x,z)\mathrm{d}z\,,\quad t>0$$

具有半群性质，即对于任给的$s,t\geq 0$

$$P_0=I,\ \ P_{s+t}=P_sP_t$$

构成作用与连续函数集合上的线性算子压缩半群。若函数$f(x)$一致连续或$f(\infty)=0$，则变换$P_tf(x)$一致连续，即对于任给的$h\to 0$

$$\|P_{t+h}f-P_tf\|\leq\|P_t\|\|P_hf-P_tf\|\leq\|P_hf-P_tf\|\to 0$$

这种按范数$\|\cdot\|$的收敛称为强收敛，记为$S-\lim$。称

$$Af \equiv S-\lim_{h\to 0^+}\frac{P_h f-f}{h}\equiv g，\ D_A=\left\{f{:}\, f\in C\text{且}Af=g\right\}$$

A 为半群$\{T_t,t\geq 0\}$或过程的强无穷小算子，D_A为算子A的定义域。至此可以建立 Brwon 运动与 Laplace 算子Δ之间的联系：设f有界，二次连续可微，二阶偏导数有界且在上一致连续，则任给$f\in D_A$，有

$$Af(x)=\frac{1}{2}\Delta f(x)，\ \Delta=\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$$

设有有界开集$\Omega\subset\mathbb{R}^n$，$n\geq 2$，$\Omega$的边界为$\partial\Omega$，$A^o=A-\partial A$，设$f(x)$是$\partial\Omega$上的已知连续函数，求$u(x)$满足

$$\begin{cases}\Delta u(x)=0，\ x\in\Omega\\ u(x)=f(x)，\ x\in\partial\Omega\end{cases}$$

Gauss 于 1840 年提出为 Laplace 方程的 Dirichlet 问题，Wieners 于 1924 年提出为 Laplace 方程的广义 Dirichlet 问题。Kakutani(1944)和 Doob(1954)分别发现 Dirichlet 问题与 Brown 运动之间的内在联系。

对于 Brown 运动$X(t)$而言，称随机变量

$$\tau_x(\omega)=f(x)=\begin{cases}\inf\{t{:}\ t>0,X(t)\in\partial\Omega\}, & \{t{:}\ t>0,X(t)\in\partial\Omega\}\neq\emptyset\\ +\infty, & \{t{:}\ t>0,X(t)\in\partial\Omega\}=\emptyset\end{cases}$$

为集合$\partial\Omega\subset\mathbb{R}^n$的首中时(first hitting time)。Dirichlet 问题有解而且可以表示为

$$u(x)=E_x\left[f\left(X(\tau_x)\right)\right]，\ x\in\Omega$$

E_x表示在$X(0)=x$下的条件期望。从而将求解 Laplace 方程与n维 Brown 运动联系起来了。

作为例子，讨论$n=2$时 Laplace 方程的 Dirichlet 问题

$$\begin{cases}\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0，\ x=(x,y)\in\Omega\\ u(x,y)=f(x,y)，\ x=(x,y)\in\partial\Omega\end{cases}$$

其中$f(x,y)$为已知有界函数，$\Omega\subset\mathbb{R}^2$为有界区域。

在Ω上作步长为h的网格. 交点称为结点. 把“最”接近边界$\partial\Omega$的点构成$\partial\Omega_h$作为对应差

分方程的边界点，Ω中其余的结点记为Ω_h，如图所示。将 Laplace 方程离散化，化为差分方程

$$\begin{cases} u(x) = \frac{1}{4}[u(x_1) + u(x_2) + u(x_3) + u(x_4) +], & x \in \Omega_h \\ u(x) = f(x), & x \in \partial\Omega_h \end{cases}$$

其中x_1, x_2, x_3, x_4是x相邻的 4 个结点。为求解差分方程，设计平面上的随机游动如下：一质点M自$x \in \Omega_h$出发作随机游动，它下一步到达 4 邻点之一的概率各为 1/4，再下一步又同样以 1/4 的概率到达该点的 4 邻点之一，且各次游动相互独立. 如此继续，直至首次到达$\partial\Omega_h$，质点被吸收停止运动。用$z = (x, y))$表示质点M首次到达$\partial\Omega_h$的点. 它是一个随机变量，以$v(x)$表示质点M从x点出发条件下，$f(z)$的数学期望，即$v(x) = E\{f(z) | 自x点出发\}$，易证$v(x) < \infty$存在，同时$v(x)$是差分方程的解. 证明如下.

令以$P(x, z)$表示从x出发的质点被吸收于$z \in \partial\Omega_h$的概率，若$x \in \Omega_h$则

$$P(x, z) = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4} P(x_i, z)$$

所以

$$v(x) = \sum_{z \in \partial D_h} P(x_i, z) f(z) = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4} P(x_i, z) f(z) = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4} v(x_i)$$

若$x \in \partial\Omega_h$则

$$P(x, z) = \begin{cases} 1, & x = z \\ 0, & x \neq z \end{cases}$$

所以

$$v(x) = \sum_{z \in \partial D_h} P(x_i, z) f(z) = f(x)$$

注意上述求解过程取决于步长h，当h充分小时，就是原始方程的解。这就是随机模拟方法求 Laplace 方程解的基本思想。

实际求解是从x点出发按上述规则随机游动直到第一次到达边界$z \in \partial\Omega_h$，重复足够多次实验$m \gg 1$。设从x点出发的第k次到达点为z_k，取

$$\bar{v}_m(x) = \frac{1}{m}\sum_{k=1}^{m} f(z_k)$$

由大数定理

$$P\left(\lim_{m\to\infty} \bar{v}_m(x) = v(x)\right) = 1$$

及

$$E\{\bar{v}_m(x)\} = v(x)$$

即$\bar{v}_m(x)$是$v(x)$的一致估计与无偏估计。进一步地，如果给出误差精度$\delta > 0$及置信度$\alpha(0 < \alpha < 1)$，就可以根据中心极限定理，使满足

$$P(|\bar{v}_m(x) - v(x)| \le \delta) = \alpha，\ x \in \Omega_h。$$

以确定所需实验次数m。

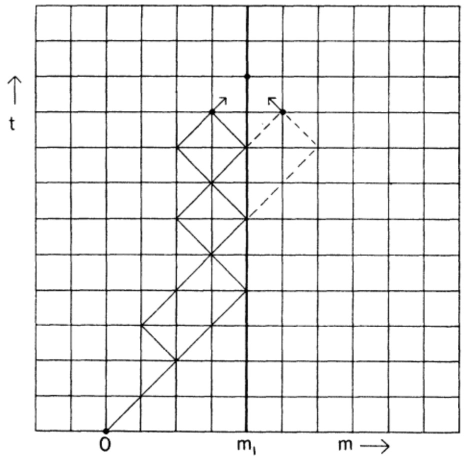
习题 23

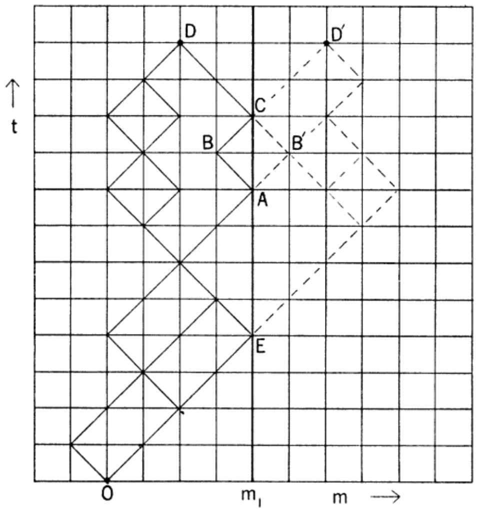
1.有吸收边界的随机游动问题。设在$m = m_1 > 0$处有吸收边界，证明粒子游动N步后到达$m < m_1$的几率$W(m, N; m_1)$为

$$W(m, N; m_1) = \left(\frac{2}{\pi N}\right)^{1/2}\left\{\exp\left(-\frac{m^2}{2N}\right) - \exp\left[-\frac{(2m_1 - m)^2}{2N}\right]\right\}$$

提示：游动N步后到达镜点$2m_1 - m$的几率$W(2m_1 - m, N)$

$$W(m, N; m_1) = W(m, N) - W(2m_1 - m, N)$$





2.有反射边界的随机游动问题。证明粒子游动N步后到达$m < m_1$的几率$W(m,N;m_1)$为

$$W(m,N;m_1)=\left(\frac{2}{\pi N}\right)^{1/2}\left\{\exp\left(-\frac{m^2}{2N}\right)+\exp\left[-\frac{(2m_1-m)^2}{2N}\right]\right\}$$

3. 选择 Langevin 方程有限差分近似

$$U^{n+1}-U^n=-\beta kU^n+B^{n+1}-B^n$$

从nk积分到$(n+1)k$，选择$\beta k<1$。当u^n已知时，则U^{n+1}取值在x和$x+\mathrm{d}x$的几率为

$$P(x\le U^{n+1}\le x+\mathrm{d}x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi k}}\exp\left[-\frac{(x-U^n+\beta kU^n)^2}{2k}\right]\mathrm{d}x$$

是从时刻nk点U^n到时刻$(n+1)k$点U^{n+1}的转移几率。由 Chapman-Kolmogorov 方程证明：当$k\to 0$时，

$$\frac{\partial}{\partial t}W(x,t)=\frac{\partial}{\partial x}[\beta xW(x,t)]+\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}W(x,t)$$

是对应于 Langevin 方程解的 Fokker-Planck 方程。

4. 设$N(t)$是t时刻的人口数量，$a(t)$是t时刻的相对人口增长率，在随机环境影响下，设

$$a(t)=r+\alpha W(t)$$

r是确定的，$W(t)$是白噪声，简单的数量增长模型

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}N(t)=a(t)N(t),\ \ N(0)=N_0$$

证明：按 Ito 解释

$$N_t=N_0\exp\left[\left(r-\frac{1}{2}\alpha^2\right)t+\alpha B_t\right]$$

按 Stratonovich 解释

$$\widetilde{N}_t=\widetilde{N}_0\exp(rt+\alpha B_t)$$

两者都是数学上的几何 Brown 运动

$$X_t=X_0\exp(\mu t+\alpha B_t)$$

5. 证明：对于$\mathbb{R}^n$上的连续函数$f(x)$，变换

$$P_tf(x)=\int_{\mathbb{R}^n}f(z)p(t;x,z)\mathrm{d}z\,,\ \ t>0$$

对于任给的$s,t\geq 0$，具有性质

$$P_0=I,\ \ P_{s+t}=P_sP_t$$