高等统计物理

王延颋

2017 年 2 月 24 日

13. 随机过程

在随机试验中，可能出现也可能不出现，而在大量重复试验中具有某种规律性的事件叫做**随机事件**。**随机过程**（Stochastic Process）是一连串随机事件动态关系的定量描述。本课程中我们只列举几个随机过程中常用的基本公式。

13.1. 马可夫过程（Markov process）

记随机变量 $X_1, X_2, \cdots, X_r$ 的联合分布（joint probability）为 $P_r\left(x_1, x_2, \cdots, x_r\right)$，则对于 $s<r$，随机变量 $X_1, X_2, \cdots, X_s$ 的边际分布（marginal probability）为

$$P_s\left(x_1, x_2, \cdots, x_s\right)=\int P_r\left(x_1, x_2, \cdots, x_s, x_{s+1}, \cdots, x_r\right) \mathrm{d} x_{s+1} \cdots \mathrm{d} x_r \tag{13.1}$$

给定 $X_{s+1}, \cdots, X_r$ 的值的条件概率（conditional probability）记为 $P_{s|r-s}\left(x_1, \cdots, x_s \mid x_{s+1}, \cdots, x_r\right)$。

如果一个随机过程对于顺序的 n 个时间点 $t_1<t_2<\cdots<t_n$ 满足

$$P_{1|n-1}\left(y_n, t_n \mid y_1, t_1; \cdots; y_{n-1}, t_{n-1}\right)=P_{1|1}\left(y_n, t_n \mid y_{n-1}, t_{n-1}\right) \tag{13.2}$$

则称之为**马可夫过程**，$P_{1|1}$ 称为跃迁几率（transition probability）。马可夫过程的物理含义是当前事件的状态完全取决于上一步骤的状态，而与再早的状态无关。因此一个马可夫过程由其初始状态 $P_1\left(y_1, t_1\right)$ 和跃迁几率 $P_{1|1}$ 完全决定。例如布朗运动中大颗粒的瞬时速度可以近似看作是服从马可夫过程的随机变量。

特别地，对于三个时间点 $t_1<t_2<t_3$，有

$$\begin{aligned} & P_3\left(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3\right)=P_2\left(y_1, t_1; y_2, t_2\right) P_{1|2}\left(y_3, t_3 \mid y_1, t_1; y_2, t_2\right) \\ & =P_1\left(y_1, t_1\right) P_{1|1}\left(y_2, t_2 \mid y_1, t_1\right) P_{1|1}\left(y_3, t_3 \mid y_2, t_2\right) \end{aligned} \tag{13.3}$$

13.2．查普曼—科尔摩格罗夫（Chapman-Kolmogorov）方程

对式(13.3)中的 y_2 进行积分，得到对于时间序列 $t_1 < t_2 < t_3$ 有

$$P_2\left(y_1,t_1;y_3,t_3\right)=P_1\left(y_1,t_1\right)\int P_{1|1}\left(y_2,t_2\mid y_1,t_1\right)P_{1|1}\left(y_3,t_3\mid y_2,t_2\right)\mathrm{d}y_2 \tag{13.4}$$

两边除以 $P_1\left(y_1,t_1\right)$，得到

$$P_{1|1}\left(y_3,t_3\mid y_1,t_1\right)=\int P_{1|1}\left(y_2,t_2\mid y_1,t_1\right)P_{1|1}\left(y_3,t_3\mid y_2,t_2\right)\mathrm{d}y_2 \tag{13.5}$$

这就是**查普曼—科尔摩格罗夫方程**。

对于任意两个非负函数 P_1 和 $P_{1|1}$，满足式(13.5)和

$$P_1\left(y_2,t_2\right)=\int P_{1|1}\left(y_2,t_2\mid y_1,t_1\right)P_1\left(y_1,t_1\right)\mathrm{d}y_1 \tag{13.6}$$

将唯一决定一个马可夫过程。

13.3．稳恒马可夫过程

对于稳恒的热力学系统，跃迁几率不依赖于时间节点，而只依赖于时间间隔 $\tau \equiv t_2 - t_1$ ，记跃迁几率为

$$T_\tau\left(y_2\mid y_1\right)\equiv P_{1|1}\left(y_2,t_2\mid y_1,t_1\right) \tag{13.7}$$

此时查普曼—科尔摩格罗夫方程成为（$\tau,\tau'>0$）

$$T_{\tau+\tau'}\left(y_3\mid y_1\right)=\int T_{\tau'}\left(y_3\mid y_2\right)T_\tau\left(y_2\mid y_1\right)\mathrm{d}y_2 \tag{13.8}$$

最著名的稳恒马可夫过程是**奥恩斯坦—乌伦贝克（Ornstein-Uhlenbeck）过程**：

$$\begin{aligned}
P_1\left(y_1\right)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-y_1^2/2\right)\\
T_\tau\left(y_2\mid y_1\right)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\left(1-\exp\left(-2\tau\right)\right)}}\exp\left(-\frac{\left(y_2-y_1\exp\left(-\tau\right)\right)^2}{2\left(1-\exp\left(-2\tau\right)\right)}\right)
\end{aligned} \tag{13.9}$$

13.4．马可夫链

一个马可夫过程如果满足如下条件，则成为马可夫链：

（1） 随机变量是一系列离散的态；

（2） 时间变量是整数：$t=\cdots,-2,-1,0,1,2,\cdots$；

（3） 跃迁几率只与时间间隔有关。

对于包含 N 个态的有限马可夫链，$P_1(y,t)$ 是一个 N 个元素的矢量 $p_n(t)$，$n=1,2,\cdots,N$，跃迁几率 $T_\tau(y_2\,|\,y_1)$ 是一个 $N\times N$ 的矩阵：

$$T_\tau=(T_1)^\tau \quad \tau=0,1,2,\cdots \tag{13.10}$$

概率分布

$$p_n(t)=T^t p(0) \tag{13.11}$$

13.5．主方程（master equation）

主方程与描述马可夫过程的查普曼—科尔摩格罗夫方程是等价的，但是使用更方便，也更容易与物理概念直接对应。主方程是随机过程理论的基础。

对于稳恒马可夫过程，当 $\tau'\to 0$ 时，跃迁矩阵

$$T_{\tau'}(y_2\,|\,y_1)=(1-a_0\tau')\delta(y_2-y_1)+\tau' W(y_2\,|\,y_1)+O(\tau') \tag{13.12}$$

其中 $y_2\neq y_1$，$W(y_2\,|\,y_1)\geq 0$ 是单位时间的跃迁几率，$(1-a_0\tau')$ 是 τ' 时间内没有跃迁发生的几率：

$$a_0(y_1)=\int W(y_2\,|\,y_1)\mathrm{d}y_2 \tag{13.13}$$

把式(13.12)代入式(13.8)，得到

$$T_{\tau+\tau'}(y_3\,|\,y_1)=(1-a_0(y_3)\tau')T_\tau(y_3\,|\,y_1)+\tau'\int W(y_3\,|\,y_2)T_\tau(y_2\,|\,y_1)\mathrm{d}y_2$$

(13.14)

除以 τ' 并取极限 $\tau'\to 0$，得到

$$\frac{\partial}{\partial\tau}T_\tau(y_3\,|\,y_1)=\int\left(W(y_3\,|\,y_2)T_\tau(y_2\,|\,y_1)-W(y_2\,|\,y_3)T_\tau(y_3\,|\,y_1)\right)\mathrm{d}y_2$$

(13.15)

这就是主方程，也可以写成更直观的形式：

$$\frac{\partial P(y,t)}{\partial t}=\int\Big(W(y\,|\,y')P(y',t)-W(y'\,|\,y)P(y,t)\Big)\mathrm{d}y' \tag{13.16}$$

对于离散的随机变量，主方程变为

$$\frac{\mathrm{d}p_n(t)}{\mathrm{d}t}=\sum_{n'\neq n}\Big(W_{nn'}p_{n'}(t)-W_{n'n}p_n(t)\Big) \tag{13.17}$$

离散形式的主方程物理意义非常明确：某个态的几率变化等于从其它态跃迁到这个态的几率减去从这个态跃迁到其它态的几率。

13.6．福克—普朗克（Fokker-Planck）方程

可以由主方程推导得到如下特殊形式的福克—普朗克方程（也叫 Smoluchowski 方程）：

$$\frac{\partial P(y,t)}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial y}A(y)P+\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2}B(y)P \tag{13.18}$$

其中 $y\in(-\infty,+\infty)$ 是连续变量，$A(y)$ 和 $B(y)$ 是可微实函数且 $B(y)>0$。该方程还可以改写成

$$\frac{\partial P(y,t)}{\partial t}=-\frac{\partial J(y,t)}{\partial y} \tag{13.19}$$

其中几率流 $J(y,t)$ 的构建方程为

$$J(y,t)=A(y)P-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial y}B(y)P \tag{13.20}$$

福克—普朗克方程还可以有其它一些等价的形式。

13.7．朗之万（Langevin）方程

布朗运动可以用朗之万方程描述：

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\gamma v + f\left(t\right) \tag{13.21}$$

其中v是颗粒速度，γ是粘滞系数，$f\left(t\right)$是小的溶剂分子碰撞颗粒所产生的随机力，满足条件

$$\left\langle f\left(t\right)\right\rangle = 0 \tag{13.22}$$

和

$$\left\langle f\left(t\right) f\left(t'\right)\right\rangle = \Gamma\delta\left(t-t'\right) \tag{13.23}$$

其中Γ是常数。可以证明朗之万方程和福克—普朗克方程等价。