arXiv:2601.07834v1 [math.PR] 12 Jan 2026

随机微分方程的完整分解

Samuel
D
u
ffi
eldsam@normalcomputing.com*Normal Computing*

2026年1月13日

摘要

我们证明，任何具有给定随时间变化的边缘分布的随机微分方程，都可以分解为三个组成部分：一个支配边缘演化的唯一标量场、一个对称半正定扩散矩阵场，以及一个斜对称矩阵场。

1 引言

随机微分方程（SDE）在众多科学与工程领域中发挥着基础性作用，为模拟受随机波动影响的系统提供了数学框架。在数理金融领域，随机微分方程通过著名的布莱克-斯科尔斯模型构成期权定价理论的基石 [4], ；而在统计物理学和分子动力学领域，它们则通过朗之万动力学描述系统向热平衡演化的过程 [26]。随机微分方程也已成为机器学习中的强大工具，借助扩散过程推动生成建模取得进展 [15, 27, 19] ，并通过马尔可夫链蒙特卡罗实现高效的采样算法 [16, 23, 8]。

路径分布 $p(x_{[0,T]})$ 描述随机过程在整个轨迹 $x_{[0,T]} = \{x_t\colon\ t \in [0,T]\}$ 上的概率测度，而时间边缘分布 $p(x,t)$ 描述该过程在每个固定时刻 t 的概率密度，二者之间存在根本区别。路径分布捕捉了过程随时间变化的相关性及其完整的联合统计量，而边缘分布 $p(x,t)$ 仅指定各个时刻的瞬时状态分布。在许多应用中，边缘分布 $p(x,t)$ 是人们主要关注的对象，因为它们可直接观测、计算上更易处理，且足以刻画平衡态或生成模型输出。一个随机微分方程能唯一确定这两者，但仅规定边缘分布 $p(x,t)$ 会使路径结构仍有很大的自由度，因为许多不同的随机微分方程可以具有相同的时变边缘分布，同时呈现不同的时间依赖关系。

本文证明，任何具有指定时间边缘分布 $p(x,\ t)$ 的随机微分方程都可以分解为三个部分：

- 一个唯一的标量场 $\phi(x,\ t)$: $\mathbb{R}^d \times [0,T] \to \mathbb{R}$，用于控制边缘演化；
- 一个对称半正定矩阵场 $D(x,\ t)$: $\mathbb{R}^d \times [0,T] \to \mathbb{R}^{d\times d}$,
- 一个反对称矩阵场 $Q(x,\ t)$: $\mathbb{R}^d \times [0,T] \to \mathbb{R}^{d\times d}$,

并且，任何具有指定时间边缘分布的随机微分方程都必须符合这一分解。定理 1 正式阐述了该分解，定理 2 则阐述了标量场 $\phi(x,\ t)$的存在性和唯一性。

2 随机微分方程的完整分解

现在，我们给出具有指定时间边缘分布的随机微分方程的完整刻画。该分解将漂移项分为三个具有直观解释的组成部分：标量场$\phi(x,\ t)$，它控制边缘分布的演化；以及对称半正定扩散矩阵 $D(x,\ t)$和反对称矩阵 $Q(x,\ t)$，它们保持概率不变。标量场 $\phi(x,\ t)$ 通过泊松方程与 $p(x,\ t)$ 相联系，而 $D(x,\ t)$ 和 $Q(x,\ t)$ 则保持边缘分布不变。

定理 1。一个随机微分方程具有时间边缘分布 $p\left(x,\ t\right)$（在温和的假设（11）下）当且仅当它具有以下形式

$$\begin{aligned} dx = &\phi(x,t)\nabla_x \log p(x,t)dt + \nabla_x \phi(x,t)dt \\ &+ [D(x,t) + Q(x,t)]\nabla_x \log p(x,t)dt + \nabla_x \cdot [D(x,t) + Q(x,t)]dt \qquad (1) \\ &+ \sqrt{2D(x,t)}dw, \\ \partial_t p(x,t) = &-\Delta_x[\phi(x,t)p(x,t)], \qquad (2) \end{aligned}$$

对于半正定 $D(x,\ t) = D(x,\ t)^\top$ 以及反对称 $Q(x,\ t) = -Q(x,\ t)^\top$。

证明：$(1) \implies p(x,\ t)$。附录C中给出了展开后的证明。

根据 [23] 的 $D(x,\ t)$ 和 $Q(x,\ t)$，式（1）中的项具有瞬时平稳分布 $p(x,\ t)$，因此在福克-普朗克方程中贡献一个零因子。

这就得到

$$dx = \phi(x,t)\nabla_x \log p(x,t)dt + \nabla_x \phi(x,t)dt,$$

其福克-普朗克方程为

$$\begin{aligned} \partial_t p(x,t) &= -\nabla_x \cdot [[\phi(x,t)\nabla_x \log p(x,t) + \nabla_x \phi(x,t)]p(x,t)], \\ &= -\Delta_x[\phi(x,t)p(x,t)], \end{aligned}$$

这正是式（2）中的泊松方程。 □

Proof: $(1) \impliedby p(x,t)$. Th证明 f i$^{\text{s prov}}$ ided in Appendix C

。从较高层面来看，它对 [12]给定的随机微分方程的福克-普朗克方程进行亥姆霍兹分解，其中时间边缘分布是预先指定的。 □

虽然扩散分量和反对称分量 $D(x,\ t)$ 与 $Q(x,\ t)$ 可以自由选择，但标量场 $\phi(x,\ t)$ 由边缘分布唯一确定。这确保了 $\phi(x,\ t)$ 包含了分布如何随时间演变的全部信息。

定理 2。对于给定的时间边缘分布 $p(x,\ t)$ 在分解 (1) 中，存在唯一的标量场 $\phi(x,\ t)$，使得 $\lim_{|x|\to\infty}[\phi(x,\ t)p(x,\ t)] = 0$。

证明：存在性。附录 ϕ中给出了两种构造 ϕ的方法，分别基于 (i) 拉普拉斯算子的基本解和 (ii) 傅里叶分析。附录 D。为简单起见，两种情况下我们均限制为 $d \geq 3$ 。

□

Proof: 唯一性。设 $\phi_1(\cdot, t)$ 和 $\phi_2(\cdot, t)$ 都满足（2），其中 $u_i(x, t)$: $= \phi_i(x, t)p(x, t)$。T hen

$$\Delta_x u_1(x, t) = -\partial_t p(x, t) = \Delta_x u_2(x, t),$$

因此 $w(x, t) := u_1(x, t) - u_2(x, t)$ 满足 $\Delta_x w(x, t) = 0$. 因此 $w(\cdot, t)$ 在 $\mathbb{R}^d$ 上是调和函数。我们假设每个 $u_i(\cdot, t)$ 在无穷远处趋于零，因此

$$\lim_{|x|\to\infty} w(x, t) = 0.$$

根据调和函数的刘维尔定理，[24], 在 $\mathbb{R}^d$ 上的任意有界调和函数——尤其是连续且在无穷远处趋于零的函数——必为常数，因而恒等于零 $w(x, t) = 0 \, \forall x, t$。因此 $u_1(x, t) = u_2(x, t)$ 对所有 x均成立。

由于我们假设 $p(x, t) > 0$ 处处成立，因此对所有 x, t，都有 $\phi_1(x, t) = \phi_2(x, t)$。 □

3 相关工作

与本文最密切相关的是关于自治随机微分方程和平稳分布的完整方案 [23]。该结果指出，一个遍历自治随机微分方程（即系数与时间无关的随机微分方程）具有给定的平稳分布 $\pi(x)$，当且仅当它具有以下形式

$$dx = [D(x) + Q(x)]\nabla_x \log \pi(x)dt + \nabla_x \cdot [D(x) + Q(x)]dt + \sqrt{2D(x)}dw, \tag{3}$$

正如我们将在第 4.1 节所见，该结果可视为我们分解（1）的一个特例。该结果的完备性是通过对福克–普朗克方程进行傅里叶分析证明的。在 [7] 关于熵产生的讨论中，作者还提供了一种基于亥姆霍兹分解的更简单方法（我们在定理 1 的证明中也使用了该方法）。此外，[2] 还给出了将遍历自治随机微分方程分解为对称分量和斜对称分量的相关分解。

在时间反演生成微分方程的背景下，[1, 13, 27], 众所周知，多个随机微分方程（以及常微分方程）可以匹配相同的时间边缘分布。尤其是，[19] 研究表明，可以叠加具有不同噪声水平的朗之万扩散，而不改变时间边缘分布。我们的分解对所有此类随机微分方程给出了完整刻画。第 4.2 节和第 4.3 节将对此作进一步阐述。

构造具有指定边缘分布的随机过程这一问题，与薛定谔桥问题密切相关，并且从更广泛的角度来看，也与最优传输相关。给定初始和终端边缘分布，薛定谔桥会选择一个扩散过程，在二者之间进行插值，同时最小化相对于参考布朗运动的相对熵 [18, 11, 22]。类似地，也有研究旨在寻找向量场，使其对于由 [14] 定义的给定传输路径满足刘维尔方程 $p(x, t)$。与这种变分视角不同，后者只选出一个特定的过程，而我们的结果则完整刻画了与给定时变边缘分布族相一致的所有随机微分方程。

4 一些推论

4.1 自治随机微分方程与平稳分布

现在我们证明，定理 1 将 [23] 中的自治完整方案推广了。对于具有平稳分布 $\pi(x)$ 的遍历自治随机微分方程，我们有

$$\partial_t p(x,t) = 0.$$

这给出了泊松方程 (2)

$$\Delta_x[\phi(x,t)p(x,t)] = 0,$$

其中 $\phi(x,t) = 0$ 是一个平凡的有界解，并且根据定理 2 也是唯一解。

取 $\phi(x,t) = 0$ 和 $p(x,t) = \pi(x)$，那么 (1) 就与 3) 中的形式完全一致，后者来自 [23]。

4.2 随机微分方程匹配

假设给定一个随机微分方程

$$dx = f(x,t)dt + \sqrt{2\Sigma(x,t)}dw, \tag{4}$$

但不一定知道边缘分布 $p(x,\ t)$。

根据定理 1，以下随机微分方程具有相同的边缘分布 $p(x,\ t)$，对于任意反对称$Q(x,\ t)$ 和半正定 $D(x,\ t)$

$$\begin{aligned} dx =& f(x,t)dt + [D(x,t) - \Sigma(x,t) + Q(x,t)]\nabla_x \log p(x,t)dt \\ &+ \nabla_x \cdot [D(x,t) - \Sigma(x,t) + Q(x,t)]dt + \sqrt{2D(x,t)}dw, \end{aligned} \tag{5}$$

我们可以看到，(5) 与 (4) 完全吻合，其中 $D(x,t) = \Sigma(x,t)$ 和 $Q(x,t) = 0$，因此根据定理 1，所有形式为 (5) 的随机微分方程，对于所有反对称 $Q(x,t)$ 和半正定 $D(x,t)$，都具有相同的边缘分布。

注意，不含5中的 Q和 D 项的 (

$$dx = f(x,t)dt - \Sigma(x,t)\nabla_x \log p(x,t)dt + \nabla_x \cdot \Sigma(x,t)dt, \tag{6}$$

具有相同的边缘分布，但不一定与不含1中的 Q和 D 项的 (（即由唯一的 ϕ导出的常微分方程），因为另一个 Q 矩阵可能已经嵌入在 (6) 中。

4.3 时间反演

众所周知， [1, 13, 5, 20] 随机微分方程（4）可进行时间反演，从而得到以下随机微分方程： $y_s = x_{T-s}$

$$dy = -\bar{f}(y,s)ds + 2\nabla_y \cdot \bar{\Sigma}(y,s)ds + 2\bar{\Sigma}(y,s)\nabla_y \log \bar{p}(y,s)ds + \sqrt{2\bar{\Sigma}(y,s)}d\bar{w}(s), \tag{7}$$

其中 $f(y,s) = f(y,T-s)$, $\Sigma(y,s) = \Sigma(y,T-s)$, $\bar{p}(y,s) = p(y,T-s)$，且 $d\bar{w}$ 为时间反演后的布朗运动。

方程（7）是严格时间反演，因为它匹配原始随机微分方程（ p（$\bar{y}_{[0,T]}$） $=p$（$x_{[0,T]}$）的路径分布（4）（这里 $\bar{y}_s = y_{T-s}$）。

在实践中，[27], 我们通常可以接受较弱的时间反演，它只匹配原始随机微分方程（p（y，s）$= p$（x，$T-s$）的时间边缘分布（4）。定理 1 和推论 4.2应用于（7），给出了所有此类时间反演的完整刻画

$$\begin{aligned} dy = &- \bar{f}(y,s)ds + [\bar{D}(y,s) + \bar{\Sigma}(y,s) + \bar{Q}(y,s)]\nabla_y \log \bar{p}(y,s)ds \\ &+ \nabla_y \cdot [\bar{D}(y,s) + \bar{\Sigma}(y,s) + \bar{Q}(y,s)]ds + \sqrt{2\bar{D}(y,s)}d\bar{w}(s), \end{aligned}$$

¯对于任意反对称的 $Q(y,\ s)$ 和半正定的 $D(y,\ s)$。

4.4 生成式去噪模型

生成模型中的一种主流策略是，训练一个参数化的常微分方程或随机微分方程，使其成为具有 p（x，0）经验数据分布 [27, 17, 19]的指定线性加噪随机微分方程的时间反演。

按照 [19], ，这个加噪过程可以写成一个线性随机微分方程

$$dx = f(t)xdt + g(t)dw, \tag{8}$$

或者等价地，写成平滑后的高斯条件分布 als

$$p(x_t \mid x_0) = \mathcal{N}(x_t \mid s(t)x_0, s(t)^2\sigma(t)^2\mathbb{I}). \tag{9}$$

参见 [19]，了解更多细节，包括如何在 $(f(t)\ g(t))$ 和 $(s(t)\ \sigma(t))$ 之间转换。

[19] 中还给出了构造该加噪过程的弱时间反演的方法 s

$$dy = -[\partial_s \bar{\sigma}(s)]\bar{\sigma}(s)\nabla_y \log \bar{p}(y,s)ds + \bar{\beta}(s)\bar{\sigma}(s)^2\nabla_y \log \bar{p}(y,s)ds + \sqrt{2\bar{\beta}(s)}\bar{\sigma}(s)d\bar{w},$$

¯对于 $\bar{\sigma}(s) = \sigma(T-s)$、$\bar{p}(y,\ s)$、$= p(y,\ T-s)$，以及任意选取的 $\beta(s) \geq 0$。

我们的分解揭示了该方法并不完整，而所有有效弱时间反演的完整构造方法为

$$\begin{aligned} dy = &- [\partial_s \bar{\sigma}(s)]\bar{\sigma}(s)\nabla_y \log \bar{p}(y,s)ds \\ &+ [\bar{D}(y,s) + \bar{Q}(y,s)]\nabla_y \log \bar{p}(y,s)ds + \nabla_y \cdot [\bar{D}(y,s) + \bar{Q}(y,s)]ds + \sqrt{2\bar{D}(y,s)}d\bar{w}(s), \end{aligned} \tag{10}$$

¯对于任意选取的反对称 $Q(y,\ s)$ 和半正定 $D(y,\ s)$。

T（10）的形式也与定理 1 中的形式完全一致，因此我们可以得出结论：

$$\phi(y,s) = -[\partial_s \bar{\sigma}(s)]\bar{\sigma}(s),$$

是满足弱时间反演加噪过程（2）泊松方程的唯一标量场（8-9）。

5 讨论

我们已经证明，指定完整的时间边缘分布族 $p(x,\ t)$，实际上就确定了动力学中唯一的一个分量：由泊松方程$\partial_t p(x,\ t) = -\Delta_x[\phi(x,\ t)p(x,\ t)]$ 定义的标量场 $\phi(x,\ t)$（在温和的正则性和衰减条件下）。与相同边缘分布相容的路径定律中，其余所有自由度都由对称半正定扩散场 $D(x,\ t)$ 和反对称场 $Q(x,\ t)$ 表示；它们具有保概率性质，即不会影响边缘分布的瞬时演化，

也就是说，它们不会影响边缘分布的瞬时演化。由此，我们得以对与给定边缘流相容的所有 随机微分方程给出完整且可构造的刻画。

鉴于这一分解具有普适性和完备性，我们预计它将启发许多自然涌现的研究方向；下面重点介绍几个有代表性的方向。第一，这一分解提出了新的优化和控制公式：可以将 D 和 Q视为可控场，在保持 $p(x,t)$不变的同时重塑时间相关性，从而为如何选择这些场提供了新的优化目标，例如最小化熵产生 [7]，、加快收敛，或降低采样和模拟中的方差 [6]。第二，在生成建模中，这一刻画完整描述了弱时间反演中的自由度，并阐明了如何引入额外噪声、不可逆流和状态依赖扩散，而不影响已学习的边缘路径。具体而言，带有 $Q = D = 0$ 的 (10) 通常称为概率流常微分方程[27, 19] ，但我们的公式指出，根据 Q的选择，可以得到无穷多个保持边缘分布的常微分方程。第三，这一框架也可能适用于从非平稳状态初始化的自治随机微分方程：即使某个随机微分方程存在平稳分布 $\pi(x)$，从 $p(x,0) \neq \pi(x)$开始也会诱发非平凡的瞬态边缘流 $p(x,t)$，而与之对应的（唯一） $\phi(x,t)$则分离出概率流中促使系统松弛至平衡态的部分。这一视角或有助于理解预热期，并设计能够保持π 、同时改善有限时间表现的马尔可夫链蒙特卡罗动力学；具体做法是在不改变不变目标分布 [23, 8]的前提下，利用 D 和 Q 的自由度。第四，自治方法 [23]已被用于设计作用于扩展空间、但仍能在某个子空间上保持平稳分布的随机微分方程（如哈密顿蒙特卡罗 [3] 和欠阻尼朗之万动力学 [16, 6]），也用于相互作用粒子 [21, 9]。我们提出的分解使得在非自治情形下也能采用类似的方法。

总而言之，这种分解为具有指定边缘分布的随机微分方程提供了一种简单且通用的组织原则：ϕ 是边缘演化的唯一特征，而 D 和 Q 则参数化了所有其余的动力学自由度。

致谢

感谢 Maxwell Aifer、Adrien Corenflos、Samuel Power 和 Max Welling 就稿件内容进行讨论并提供宝贵反馈。

参考文献

[1] Brian DO Anderson. 反向时间扩散方程模型。随机过程及其应用，12(3):313–326，1982。[2] Ping Ao. 随机微分方程中的势：一种新颖的构造。物理学*A*辑：数学与通用，37(3):L25，2004。[3] Michael Betancourt. 哈密顿蒙特卡罗的概念性介绍。*arXiv* 预印本 *arXiv:1701.02434*，2017。[4] Fischer Black 和 Myron Scholes. 期权与公司负债的定价。政治经济学杂志，81(3):637–654，1973。[5] Patrick Cattiaux、Giovanni Conforti、Ivan Gentil 和 Christian Léonard. 有限熵条件下扩散过程的时间反演。载于亨利·庞加莱研究所年刊（*B* 辑）：概率与统计，第59卷，1844–1881页。亨利·庞加莱研究所，2023年。

[6] Martin Chak、Nikolas Kantas、Tony Lelièvre 和 Grigorios A Pavliotis. 欠阻尼朗之万采样的最优摩擦矩阵。*ESAIM*：数学建模与数值分析，57(6):3335–3371，2023。[7] Lancelot Da Costa 和 Grigorios A Pavliotis. 平稳扩散过程的熵产生。物理学*A*辑：数学与理论，56(36):365001，2023。[8] Samuel Duffield、Kaelan Donatella、Johnathan Chiu、Phoebe Klett 和 Daniel Simpson. 使用后验分布的可扩展贝叶斯学习。*arXiv* 预印本 *arXiv:2406.00104*，2024。[9] Andrew Duncan、Nikolas Nüsken 和 Lukasz Szpruch. 关于 Stein变分梯度下降的几何。机器学习研究杂志，24(56):1–39，2023。[10] Gerald B Folland. 偏微分方程导论，第102卷。普林斯顿大学出版社，1995。[11] Hans Föllmer. 随机场与扩散过程。数学讲义，1362:101–203，1988。[12]Erhard Glötzl 和 Oliver Richters. n维解析向量场的亥姆霍兹分解与势函数。数学分析与应用杂志，525(2):127138，2023。[13] Ulrich G Haussmann 和 Etienne Pardoux. 扩散过程的时间反演。概率年刊，1188–1205页，1986。[14] Jeremy Heng. 关于在蒙特卡罗模拟中使用传输与最优控制方法。博士论文，牛津大学，2016。[15] Jonathan Ho、Ajay Jain 和 Pieter Abbeel. 去噪扩散概率模型。神经信息处理系统进展，33:6840–6851，2020。[16] Alan M Horowitz. 一种广义引导式蒙特卡罗算法。物理学快报*B*，268(2):247–252，1991。[17] Chin-Wei Huang、Jae Hyun Lim 和 Aaron C Courville. 基于扩散的生成模型与得分匹配的变分视角。神经信息处理系统进展，34:22863–22876，2021。[18] Benton Jamison. 互易过程。概率论与相关领域杂志，30(1):65–86，1974。[19]Tero Karras、Miika Aittala、Timo Aila 和 Samuli Laine. 阐明基于扩散的生成模型的设计空间。神经信息处理系统进展，35:26565–26577，2022。[20] Ji-Ha Kim. 推导反向时间随机微分方程（SDE），2025年2月。[21] Benedict Leimkuhler、Charles Matthews 和 Jonathan Weare. 马尔可夫链蒙特卡罗模拟的集合集预条件。统计与计算，28(2):277–290，2018。[22] Christian Léonard. 薛定谔问题及其与最优传输若干联系的综述。离散与连续动力系统*A*辑，34(4):1533–1574，2014。

[23] Yi-An Ma、Tianqi Chen 和 Emily Fox。《随机梯度马尔可夫链蒙特卡罗的完整方案》。神经信息处理系统进展，第 28 卷，2015 年。

[24] Edward Nelson。《刘维尔定理的一个证明》。载于美国数学会会议录，第 12 卷，第 995 页，1961 年。

[25] Grigorios A Pavliotis。《随机过程及其应用》。应用数学丛书，第 60 卷，2014 年。

[26] Hannes Risken。《福克-普朗克方程》。载于福克-普朗克方程：求解方法与应用，第 63–95 页。施普林格，1989 年。

[27] Yang Song、Jascha Sohl-Dickstein、Diederik P Kingma、Abhishek Kumar、Stefano Ermon 和 Ben Poole。《通过随机微分方程进行基于分数的生成建模》。*arXiv* 预印本 *arXiv:2011.13456*，2020 年。

[28] Elias MStein. 《奇异积分与函数的可微性》. 普林斯顿大学出版社，1970 年。

记号

- 对于向量场 $v\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$，我们记 $\nabla \cdot v(x) \coloneqq \sum_{i=1}^d \partial_{x_i} v_i(x)$。
- 对于矩阵场 $A\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d\times d}$，我们将矩阵散度定义为 $[\nabla \cdot A(x)]_i \coloneqq \sum_{j=1}^d \partial_{x_j} A_{ij}(x)$，其中 $\nabla \cdot A\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$.
- 对于标量场 $g\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$，拉普拉斯算子为 $\Delta g(x) \coloneqq \nabla \cdot \nabla g(x) = \sum_{i=1}^d \partial_{x_i}^2 g(x)$。
- 对于 $k \in \mathbb{N}$，我们用 $C^k(\mathbb{R}^d)$ 表示由 k次连续可微函数$f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$构成的空间。
- 对于 $1 \le p < \infty$，我们用 $L^p(\mathbb{R}^d)$ 表示满足以下条件的可测函数 $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ $\|f\|_{L^p} \coloneqq (\int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^p \, dx)^{1/p}$ 有限的空间。
- 如果存在 $M > 0$，使得对所有 $x \in \mathbb{R}^d$都有 $|f(x)| \le M$，则称标量场 $f\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 是有界的。
- 如果存在 $\varepsilon > 0$ 使得 $\lim_{|x|\to\infty} |x|^{d+\varepsilon}|f(x)| = 0.$，则称函数 $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^n$ 在无穷远处充分衰减。
- 如果一个随机微分方程的系数与时间无关，即具有形式$dx = b(x)dt + \sqrt{2D(x)}dw$，则称该随机微分方程是自治的。如果一个自治随机微分方程具有唯一的平稳分布，则称其是遍历的。
- 对于满足 $a, b \in \mathbb{R}$ 的复数 $z = a+bi \in \mathbb{C}$，我们将其复共轭记为 $\bar{z} = a-bi$。
- 我们将（可能为复数的）标量场 f 的傅里叶变换记为：$\mathbb{R}^d \to \mathbb{C}$ $\mathrm{FT}[f](\xi) = \int e^{-ix^\top \xi} f(x)\, dx$，其中 $\mathrm{FT}[f]\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{C}$。
- 我们将（可能为复数的）标量场 $g : \mathbb{R}^d \to \mathbb{C}$ 的逆傅里叶变换记为 $\mathrm{IFT}[g](x) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int e^{ix^\top \xi} g(\xi) d\xi$，其中 $\mathrm{IFT}[g]\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{C}$。

B 假设

全文中，我们对 $p(x,\ t)$ 作出以下温和的假设：

$$p(x,t) > 0 \quad \forall x,t, \tag{11a}$$
$$p(\cdot,t) \in C^2(\mathbb{R}^d) \quad \forall t, \tag{11b}$$
$$p(x,\cdot) \in C^1(\mathbb{R}) \quad \forall x, \tag{11c}$$
$$\int p(x,t)dx = 1 \quad \forall t, \tag{11d}$$
$$p(\cdot,t), \nabla_x p(\cdot,t) \text{ and } \partial_t p(\cdot,t) \text{ decay sufficiently at infinity } \forall t. \tag{11e}$$

我们还注意到，在无穷远处充分衰减条件蕴含 $p(\cdot,t)$ $\nabla_x p(\cdot,t)$ $\partial_t p(\cdot,t)$ $\in L^1(\mathbb{R}^d)$。这是因为，若对某个 $\varepsilon > 0$，有 $\lim_{|x|\to\infty} |x|^{d+\varepsilon}|f(x)| = 0$，则 $|f(x)| \le C|x|^{-d-\varepsilon}$ for $|x| \ge R$，因此

$$\int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|\,dx \le \int_{|x|\le R} |f(x)|\,dx + C\int_{|x|\ge R} |x|^{-d-\varepsilon}\,dx < \infty,$$

所以 $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$。

这些假设在实际中通常都能满足，并且足以证明福克-普朗克方程的有效性以及分部积分的适用性，见 [25] 第 4.1 节。

例如，对于形如 $p(x,t) \propto \exp(-U(x,t))$ 的分布，这些假设都能满足，其中 $U(x,t)$ 在尾部呈超对数增长。

C 定理 1 的证明

为方便读者，我们重述定理 1 。

定理 1. 一个随机微分方程具有时间边缘分布 $p(x,\ t)$ (在满足温和假设（11）的情况下）当且仅当它具有以下形式

$$\begin{aligned} dx = {} & \phi(x,t)\nabla_x \log p(x,t)dt + \nabla_x \phi(x,t)dt \\ & + [D(x,t) + Q(x,t)]\nabla_x \log p(x,t)dt + \nabla_x \cdot [D(x,t) + Q(x,t)]dt \\ & + \sqrt{2D(x,t)}dw, \end{aligned} \tag{12}$$
$$\partial_t p(x,t) = -\Delta_x[\phi(x,t)p(x,t)], \tag{13}$$

对于对称半正定 $D(x,\ t) = D(x,\ t)^\top$ 以及反对称 $Q(x,\ t) = -Q(x,\ t)^\top$。

证明：(1) $\implies$ $p(x,\ t)$。我们需要证明，将福克-普朗克方程应用于（12）后可化为泊松方程（13）。

完整的福克-普朗克方程（另见（15））为

$$\begin{aligned} \partial_t p(x,t) = {} & -\nabla_x \cdot \big[[\phi(x,t)\nabla_x \log p(x,t) + \nabla_x \phi(x,t)]p(x,t) \\ & + [[D(x,t) + Q(x,t)]\nabla_x \log p(x,t)]p(x,t) + [\nabla_x \cdot [D(x,t) + Q(x,t)]]p(x,t) \\ & - \nabla_x \cdot [D(x,t)p(x,t)]\big]. \end{aligned}$$

根据关于自治随机微分方程的 [23] 结果，我们可以证明，包含 Q 和 D 的项计算结果为零。

根据散度算子 $\nabla\cdot$ 的线性性质，我们只需考虑 Q 项

$$\begin{aligned} Q \text{ terms} &= -\nabla_x \cdot \big[Q(x,t)[\nabla_x \log p(x,t)]p(x,t) + [\nabla_x \cdot Q(x,t)]p(x,t)\big], \\ &= -\nabla_x \cdot \nabla_x \cdot [Q(x,t)p(x,t)] \\ &= 0. \end{aligned}$$

第二行用到了（反向）乘积法则，第三行则用到了 Q的反对称性。同理， D 项

$$\begin{aligned} D \text{ terms} &= -\nabla_x \cdot \big[D(x,t)[\nabla_x \log p(x,t)]p(x,t) + [\nabla_x \cdot D(x,t)]p(x,t) - \nabla_x \cdot [D(x,t)p(x,t)]\big], \\ &= -\nabla_x \cdot [\nabla_x \cdot D(x,t)p(x,t) - \nabla_x \cdot [D(x,t)p(x,t)]] \\ &= 0. \end{aligned}$$

由此，福克-普朗克方程可写为

$$\begin{aligned} \partial_t p(x,t) &= -\nabla_x \cdot [[\phi(x,t)\nabla_x \log p(x,t) + \nabla_x \phi(x,t)]p(x,t)], \\ &= -\nabla_x \cdot [\nabla_x [\phi(x,t)p(x,t)]], \\ &= -\Delta_x [\phi(x,t)p(x,t)], \end{aligned}$$

这恰好就是式（13）中的泊松方程。 □

证明：（12） $\Longleftarrow$ p（x， t）。现在假设给定一个随机微分方程

$$dx = b(x,t)dt + \sqrt{2D(x,t)}dw, \tag{14}$$

其时间边缘分布为 $p(x,\ t)$。现在我们需要证明，存在一个标量场 $\phi(x,\ t)$ 和一个反对称矩阵场 $Q(x,\ t)$，使得

$$b(x,t) = \phi(x,t)\nabla_x \log p(x,t) + \nabla_x \phi(x,t) + [D(x,t) + Q(x,t)]\nabla_x \log p(x,t) + \nabla_x \cdot [D(x,t) + Q(x,t)].$$

方程（14）的福克-普朗克方程形式为

$$\begin{aligned} \partial_t p(x,t) &= -\nabla_x \cdot J(x,t), \\ J(x,t) &= b(x,t)p(x,t) - \nabla_x \cdot [D(x,t)p(x,t)]. \end{aligned} \tag{15}$$

在 11 对 p及有界 b， D向量场 $J(x,\ t)$ 在无穷远处充分衰减，因此亥姆霍兹分解 [12]指出，它可分解为保守分量和无散分量

$$\begin{aligned} J(x,t) &= \nabla_x [\phi(x,t)p(x,t)] + c(x,t)p(x,t), \\ \nabla_x \cdot [c(x,t)p(x,t)] &= 0. \end{aligned} \tag{16}$$

根据 [12] 中的 3.10，我们有向量场 $c(x,\ t)$ 满足

$$\nabla_x \cdot [c(x,t)p(x,t)] = 0 \iff c(x,t) = Q(x,t)\nabla_x \log p(x,t) + \nabla \cdot Q(x,t),$$

对于反对称的 $Q(x,\ t) = -Q(x,\ t)^\top$ 以及 $c(x,\ t)p(x,\ t) = \nabla_x \cdot [Q(x,\ t)p(x,\ t)]$。

结合以上内容可得

$$
\begin{aligned}
& b(x,t)p(x,t) = \nabla_x[\phi(x,t)p(x,t)] + \nabla_x \cdot [Q(x,t)p(x,t)] + \nabla_x \cdot [D(x,t)p(x,t)], \\
\implies & b(x,t) = \phi(x,t)\nabla_x \log p(x,t) + \nabla_x \phi(x,t) \\
& \qquad + [D(x,t) + Q(x,t)]\nabla_x \log p(x,t) + \nabla_x \cdot [D(x,t) + Q(x,t)].
\end{aligned}
$$

假设 $p(x,\ t) > 0$ 处处成立。现在这与（12）相符。

最后，泊松方程（13）可直接由（16）得出

$$
\begin{aligned}
\partial_t p(x,t) &= -\nabla_x \cdot \nabla_x[\phi(x,t)p(x,t)] - \nabla_x \cdot [c(x,t)p(x,t)], \\
&= -\Delta_x[\phi(x,t)p(x,t)].
\end{aligned}
$$

□

D 定理2 （存在性）的证明

为便于读者理解，我们重述定理 2 。

> **定理 2**。 给定时间边缘分布 $p(x,\ t)$，存在唯一的标量 lar
> 场 $\phi(x,\ t)$ 属于分解（1），使得 极限$_{|x|\to\infty}[\phi(x,\ t)p(x,\ t)] = 0$。

我们给出两种证明，说明满足假设（ ϕ ）的给定分布 $p(x,t)$ 对应的标量场 2（ $d \geq 3$）存在，且该标量场满足泊松方程（ $d = 1$） 。在两种情况下，我们都假设 11 ； 有关泊松方程解的全面论述（包括 [10]）请参见 ϕ 。我们还指出，根据正文中已证明的 ϕ的唯一性，由这两种构造得到的 。

D.1 $\phi(x,t)$ 通过拉普拉斯算子的基本解

证明：存在性。我们寻求泊松方程的一个解 ϕ

$$
\begin{aligned}
\partial_t p(x,t) &= -\Delta_x u(x,t), \\
u(x,t) &= \phi(x,t)p(x,t).
\end{aligned}
$$

将 $\mathbb{R}^d$ 中拉普拉斯算子的基本解（例如参见 [10] 第 2 章）定义为：

$$
\Phi(x) := \frac{|x|^{2-d}}{d(d-2)\omega_d}, \qquad d \geq 3,
$$

其中 ω_d 表示 $\mathbb{R}^d$ 中单位球的体积。对于可积的 $f \in C^2(\mathbb{R}^d)$，函数 $g(x) = \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(x-y)f(y)dy$ 有定义且局部可积，并且

$$
\Delta_x \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(x-y)f(y)\,dy = -f(x).
$$

因此我们可以设定

$$
u(x,t) = \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(x-y)\partial_t p(y,t)dy.
$$

注意到，我们的假设（11）意味着 $\partial_t p(x,\ t)$ 和 $\int \partial_t p(x,\ t)dx = 0$的可积性。此外，根据 $\lim_{|x|\to\infty} u(x,\ t) = 0$ 的定义，以及 Φ 和 $\partial_t p$ 在无穷远处充分衰减，也可推出这一点。

由此可得 $\Delta_x u(x,\ t) = -\partial_t p(x,\ t)$。因此，我们可以令 $\phi(x,\ t) = u(x,\ t)/p(x,\ t)$ 在 $p(x,\ t)$ 处处成立。

□

D.2 ϕ（x，t）的傅里叶变换

证明：存在性。我们寻求泊松方程的一个解 ϕ

$$\begin{aligned} \partial_t p(x,t) &= -\Delta_x u(x,t), \\ u(x,t) &= \phi(x,t)p(x,t). \end{aligned}$$

由于 $\partial_t p$ 在无穷远处衰减得足够快，因此拉普拉斯算子与傅里叶变换之间存在如下关系（例如，中的第五章，或 [10]中的第2-C章）

$$\mathrm{FT}(\Delta_x u)(\xi,t) = -|\xi|^2 \mathrm{FT}(u)(\xi,t).$$

Thus

$$\begin{aligned} \mathrm{FT}(u)(\xi,t) &= -|\xi|^{-2}\mathrm{FT}(\Delta_x u)(\xi,t), \\ &= |\xi|^{-2}\mathrm{FT}(\partial_t p)(\xi,t) := v(\xi,t), \\ u(x,t) &= \mathrm{IFT}[v](x,t). \end{aligned}$$

其中，我们的假设 (11) 推出 $\int \partial_t p(x,t)dx = 0\ \forall t$，进而推出 $\mathrm{FT}(\partial_t p)(0,t) = 0$，因此 $\mathrm{FT}(u)(0,t) = 0$ 对于 $\xi = 0$ 有明确定义。此外，$\partial_t p$ 有界且连续，因此 $v(\xi,t)$ 在 $\xi = 0$ 附近对于 $d \geq 3$ 局部可积。

由于 $\partial_t p(\cdot,\ t)$ 是实值的，因此我们有厄米对称性 $\mathrm{FT}(\partial_t p)(-\xi,\ t) = \overline{\mathrm{FT}(\partial_t p)(\xi,\ t)}$；由于 $|\xi|^{-2}$ 是实且偶的，因此可得 $v(-\xi,\ t) = v(\xi,\ t)$，进而 $u(x,\ t) = \mathrm{IFT}[v](x,\ t)$ 是实值的。

□