arXiv:2603.01077v1 [math.DS] 1 Mar 2026

随机动力系统的核方法及其在库普曼特征函数中的应用：

Feynman–Kac 表示与再生核希尔伯特空间近似

Boumediene Hamzi[1,2],Houman Owhadi[1],和 Umesh Vaidya[3]

[1]加州理工学院计算与数学科学系，美国加利福尼亚州帕萨迪纳[2]英国伦敦艾伦·图灵研究所[3]克莱姆森大学机械工程系，美国南卡罗来纳州克莱姆森

2026年3月3日

摘要

我们将针对输运方程和库普曼特征函数的统一核框架——该框架在 [1] 中为确定性系统提出——扩展至随机微分方程（SDE）。在确定性情形下，已有研究证明，三种基于解析理论的构造——Lions 型变分原理、格林函数卷积，以及沿特征线流的预解算子——可得到相同的再生核。对于随机系统，库普曼生成元包含二阶扩散项，使得一阶双曲型输运方程转变为二阶椭圆-抛物型偏微分方程。这一根本变化要求我们以基于 Feynman–Kac 公式的概率表示取代特征线法。

我们的主要贡献包括：(i) 通过 Feynman–Kac 路径积分表示，将这三种核构造全部扩展到随机系统；(ii) 证明在一致椭圆性假设下核等价；(iii) 提出一种纳入二阶微分算子的基于配置点的计算框架；(iv) 给出误差界，将再生核希尔伯特空间近似误差与蒙特卡罗采样误差区分开来；(v) 分析扩散对数值条件性的影响；以及 (vi) 探讨与生成元 EDMD、扩散映射和核类比预测的联系。针对奥恩斯坦–乌伦贝克过程、扩散强度各异的非线性随机微分方程以及多维系统开展的数值实验验证了理论成果，并表明中等扩散可通过椭圆正则化改善数值稳定性。

关键词： Koopman算子、随机微分方程、Feynman–Kac 公式、再生核希尔伯特空间、输运方程、变分方法

目录

1 引言 **3**

2 预备知识 **5**

2.1 确定性框架回顾.5 2.2 随机动力系统.6 2.3 线性–非线性分解.6

3 随机核构造 **7**

3.1 带扩散的 Lions 型变分原理.8 3.2 通过 Feynman–Kac 得到的格林函数.8

3.3 随机预解核.10 3.4 核等价定理.12 3.5 亚椭圆扩展.15

4 计算方法 **15**
4.1 配点法.15 4.2 高斯径向基函数的核导数.16 4.3 蒙特卡洛Feynman–Kac近似.17 4.4 配置-蒙特卡洛组合方法.18 4.5 完整算法.19

5 误差界 **19**
5.1 边界稳定性.19 5.2 再生核希尔伯特空间近似误差.20 5.3 总误差分解.21 5.4 扩散对条件性的效应.23

6 与相关方法的联系 25
6.1 生成元扩展动态模态分解（gEDMD）.25 6.2 扩散映射.25 6.3 核类比预测.25

7 数值　　实验 2 **6**
7.1 度量指标.26 7.2 测试 1：奥恩斯坦–乌伦贝克过程.26 7.3 测试 2：二次非线性.27 7.4 测试 3：二维线性系统.27 7.5 可视化.29 7.6 总结.29

8 结论 **29**

亚椭　　椭圆核等价 2 **9**
A.1 设置与假设.29 A.2 亚椭圆算子的边界正则性.30 A.3 变分表述与强制性.31 A.4 核等价定理.32

B 次椭圆正则性与嵌入 **32**

C 欠阻尼朗之万动力学 **33**

D 次椭圆性下的数值分析 33
D.1 RKHS 逼近率.33 D.2 条件性分析.34 D.3 退化系统的实现指南.34 D.4 结论.34

1 引言

再生核希尔伯特空间（RKHS）理论长期以来一直是分析和数值近似偏微分方程（PDE）解的有力框架。在开创性工作中，雅克-路易·利翁 [2,3] 证明，可以在适当选取的希尔伯特空间——通常是点求值连续的索伯列夫空间——中，通过变分表述“求逆”椭圆算子，从而得到再生核。具体而言，利翁表明，若选取一个希尔伯特空间 $\mathcal{H}$，使其中的点求值泛函$\delta_x : \mathcal{H} \to \mathbb{R}, \ \delta_x(u) = u(x)$ 连续，则由里斯表示定理，存在唯一函数 $K(x,\cdot) \in \mathcal{H}$ （称为再生核），满足 $u(x) = \langle u, K(x,\cdot)\rangle_{\mathcal{H}}$对所有 $u \in \mathcal{H}$成立。在适当假设下——例如区域的光滑性以及适当的边界正则性——默瑟定理保证 $K(x,y)$具有正交归一展开 $K(x,y) = \sum_{j=0}^{\infty} \psi_j(x)\psi_j(y)$，其中 $\{\psi_j\}$ 是 $\mathcal{H}$的正交归一基。在这些思想的基础上，Engliˇs、Lukkassen、Peetre 和 Persson [4] 将这一变分框架推广到更广泛的一类椭圆算子，而 Auchmuty [5]则通过谱（斯捷克洛夫）展开发展了另一种方法。

时间序列数据遍布各个科学领域，推动了大量基于统计学和机器学习方法的预测方法的发展 [46–63]。动力系统理论提供了理解这类数据背后支配规律的工具。现代数据驱动方法，包括非线性动力学稀疏辨识（SINDy） [53],、深度学习方法 [52, 60], 以及物理信息机器学习 [63], ，已在从观测数据中提取动力学结构方面取得了显著成功。

库普曼算子理论源于 Koopman 的奠基性工作 [6], ，为研究非线性动力学提供了线性视角。Koopman算子是一个线性、无限维算子，它支配着非线性动力系统轨迹上可观测量的演化 [7–9]。库普曼分析的核心目标之一是提取该算子的特征函数，因为它们揭示了系统内在的模态结构。主特征函数揭示了状态空间的几何结构：其联合零水平集刻画了平衡点的稳定与不稳定流形 [7], ，能够确定稳定性边界和吸引域 [11,13,14], ，并在最优控制综合中发挥关键作用 [12,15]。 [16]中提出了一种计算 Koopman 特征函数的路径积分表述。然而，仍存在一些挑战：Koopman算子通常同时具有离散谱和连续谱 [7], ，而通过有限维投影逼近无限维算子可能导致谱污染 [17]。数据驱动库普曼学习方法，例如扩展动态模态分解（EDMD） [10], ，通过在预先选定的基函数空间上进行作用来逼近Koopman算子。

核方法为预测提供解析不确定性估计——既可在贝叶斯框架中通过高斯过程 [70] ，也可通过RKHS 范数中的频率学派集中界。近期进展将核方法与Koopman 算子理论相结合 [18–21]„利用再生核希尔伯特空间框架 [22] 以改进正则化、收敛与可解释性 [23,24]。核方法如今在动力系统分析中发挥着核心作用： [26,27,35–37]针对再生核希尔伯特空间中的非线性控制系统发展了平衡降阶与经验估计量；[28] 将核方法推广到离散时间系统； [29, 30] 发展了用于中心流形近似的贪心核方法； [31] 展示了如何从含噪数据近似李雅普诺夫函数； [32] 引入了核流视角，随后被推广到稀疏表示 [39] 与吸引子学习 [40]； [33]发展了Koopman 生成元的基于核的近似； [34]通过转移流形的核嵌入引入了降维； [25, 38] 分析了具有临界转变的多尺度系统的核方法； [41]发展了在再生核希尔伯特空间中传播不确定性的方法； [42,43]建立了面向Koopman特征函数与微分方程的核方法；以及 [44]发展了用于数据自适应核学习的核平方和方法。对基于核的其他贡献

动力系统分析包括代理建模 [45] 和核类比预测 [65]。在一篇配套论文中 [1], , 我们建立了一个统一框架，用于构造专门适用于输运方程和确定性动力系统的 Koopman 特征函数的再生核。对于确定性系统 $\dot{x} = f(x)$，我们利用主特征函数具有与平衡点处线性化相匹配的特征值这一事实，将谱计算问题归结为求解线性平流型偏微分方程： $f(x) \cdot \nabla\phi(x) = \lambda\phi(x)$。我们采用了三种互补方法：Lions变分方法通过图范数 $\|u\|_{\mathcal{H}}^2 = \|u\|_{L^2}^2 + \|Lu\|_{L^2}^2$ 定义希尔伯特空间，并将核表示为点求值的 Riesz 表示元；格林函数方法构造迟滞格林函数 $G(x,\xi)$，使其满足 $L_x G(x,\xi) = \delta(x-\xi)$，并通过卷积 $K_G(x,y) = \int_\Omega G(x,\xi)G(y,\xi)w(\xi)\, d\xi$形成核；特征线法则利用流 $s_t(x)$，通过拉普拉斯变换$K_\alpha^{\mathrm{res}}(x,y) = \int_0^\infty e^{-\alpha t}\delta(y - s_t(x))\, \mathrm{d}t$构造预解核。在适当假设下，这些构造产生等价的再生核，其统一性可由下图概括：格林函数 $\longleftrightarrow$Lions变分方法 $\longleftrightarrow$ 特征线法。该确定性框架还确立了Mercer模态向 Koopman 特征函数的谱收敛、边界正则化技术、多核学习方案以及路径积分核构造。

尽管确定性框架适用于包括平流方程、连续性方程和刘维尔方程在内的输运方程，但它无法直接处理具有随机强迫的系统。在许多实际应用中，动力系统会受到随机扰动。在分子动力学中，热涨落驱动朗之万动力学 $dq = M^{-1}p\,\mathrm{d}t$,$dp = -\nabla V(q)\,\mathrm{d}t - \gamma M^{-1}p\,\mathrm{d}t + \sqrt{2\gamma k_B T}\mathrm{d}W$，其中随机Koopman特征函数揭示子稀有事件中的亚稳态、最优反应坐标和committor函数。在金融数学中，Heston模型 $dS = \mu S\mathrm{d}t + \sqrt{V}S\, dW_1$, $dV = \kappa(\theta - V)\,\mathrm{d}t + \xi\sqrt{V}\, dW_2$ 等随机波动率模型所具有的特征函数，可识别主要风险因子，并通过谱展开实现期权定价。在气候建模中，具有湍流扩散的海气系统会呈现持续型模式（厄尔尼诺、北大西洋涛动），这些模式表现为缓慢的Koopman模态，而特征值谱则指示了可预报性的时间尺度。在随机控制中，对于系统 $dX = (G(X) + B(X)u)\,\mathrm{d}t + \sigma(X)\,\mathrm{d}W$，Koopman方法可在变换坐标中实现线性控制设计，并通过基于特征函数的目标函数实现风险敏感控制。

这促使我们将统一核框架扩展到随机微分方程（SDE）。考虑如下 Itˆo 随机微分方程

$$dX_t = G(X_t)\,\mathrm{d}t + \sigma(X_t)\,\mathrm{d}W_t, \tag{1}$$

其中 $G : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ 是漂移项， $\sigma : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d\times m}$ 是扩散矩阵，而 W_t 是一个m维维纳过程。随机 Koopman 算子定义为 $(U_t g)(x) = \mathbb{E}[g(X_t) \mid X_0 = x]$，其无穷小生成元为 Kolmogorov 后向算子：

$$(\mathcal{K}g)(x) = G(x)\cdot\nabla g(x) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left[a(x)\nabla^2 g(x)\right], \tag{2}$$

其中 $a(x) = \sigma(x)\sigma(x)^\top$ 是扩散张量。与确定性情形的关键区别显而易见：Koopman特征函数方程 $\mathcal{K}\phi = \lambda\phi$ 变为二阶椭圆－抛物型偏微分方程，而非一阶双曲型输运方程。这从根本上改变了数学结构：特征线法不再能直接应用；扩散项会使解呈现平滑效应；适定性理论从双曲型框架转向椭圆型／抛物型框架，并以一致椭圆性取代因果性；而通过 Feynman–Kac 公式 [67] 进行概率表示则成为自然的工具。二阶导数要求核具有更高的光滑性（$C^{2,\,2}$ 而非 $C^{1,\,1}$），扩散项带来的椭圆正则化还可以改善条件性。

本文将 [1] 的统一框架扩展到随机系统。我们的主要贡献如下。首先，我们将全部三种核构造——变分法、格林函数法

和预解式法——扩展到随机微分方程，以 Feynman–Kac 公式取代特征线法；随机预解核变为 $k_{\mathrm{res}}(x,\ y) = \mathbb{E}_x[\int_0^\infty e^{-\lambda t}\delta(y - X_t)\,\mathrm{d}t]$，即对随机轨迹进行积分。其次，我们证明，在一致椭圆性和温和的正则性假设下，这三种随机核构造产生相同的再生核：$k_{\mathrm{var}}(x,\ y) = k_{\mathrm{FK}}(x,\ y) = k_{\mathrm{res}}(x,\ y)$。第三，我们表明，当 Koopman 特征函数属于再生核希尔伯特空间时，所构造核的 Mercer特征函数在 L^2 中收敛于 Koopman 特征函数。第四，我们针对二阶Koopman偏微分方程开发了一种基于配置点的方法，并推导出扩散矩阵 $D_{ij} = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a(x_i)\nabla_x^2 k(x_i,\ x_j)]$的显式公式。第五，我们提供了用于基于路径的估计的蒙特卡洛Feynman–Kac算法，其误差界清晰地区分了再生核希尔伯特空间近似误差与采样误差。第六，我们分析了扩散如何影响数值条件性，并证明中等扩散可通过椭圆正则化提高稳定性。第七，我们阐明了生成元 EDMD、[64], 扩散映射 [66],以及核类比预测 [65]之间的关系。

本文结构如下。第 2 节回顾确定性框架并介绍随机情形。第 3 节提出三种随机核构造，并证明它们等价。第 4 节介绍计算方法，包括配点法和蒙特卡罗方法。第 5 节建立误差界。第 6 节讨论与相关方法的联系。第 7 节给出数值实验。第 8 节作总结。

2 预备知识

我们简要回顾确定性框架 [1] ，然后介绍随机情形 g.

2.1 确定性框架回顾

对于 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ 上的确定性系统 $\dot{x} = f(x)$，Koopman 特征函数方程是以下一阶输运偏微分方程

$$f(x) \cdot \nabla\phi(x) = \lambda\phi(x). \tag{3}$$

其中 [1], 构造了三种等价的核:

Lions变分方法。 定义算子 $L\phi = f \cdot \nabla\phi - \lambda\phi$ 和带图范数 $\|u\|_{\mathcal{H}}^2 = \|u\|_{L^2}^2 + \|Lu\|_{L^2}^2$的希尔伯特空间。变分核 $K_{\mathrm{var}}(x,\ y)$是该空间中点求值的Riesz 表示元。

格林函数。 迟滞格林函数 $G(x,\ \xi)$满足 $L_x G(x,\ \xi) = \delta(x-\xi)$，并具有因果性。该核通过卷积构造:

$$K_G(x,y) = \int_\Omega G(x,\xi)G(y,\xi)w(\xi)\,d\xi. \tag{4}$$

特征线法。 沿流 $s_t(x)$，解满足 $\phi(s_t(x)) = e^{\lambda t}\phi(x)$。预解核是其拉普拉斯变换:

$$K_\alpha^{\mathrm{res}}(x,y) = \int_0^\infty e^{-\alpha t}\delta(y - s_t(x))\,\mathrm{d}t, \quad \alpha > \Re(\lambda). \tag{5}$$

[1] 的核统一定理在适当的正则性条件下确立了 $K_{\mathrm{var}} \equiv K_G \equiv K_\alpha^{\mathrm{res}}$。

2.2 随机动力系统

我们在以下基本假设下考虑随机微分方程（1）。

假设 2.1 (正则性**)。** 漂移项 $G \in C^2(\mathbb{R}^d;\mathbb{R}^d)$ 和扩散 $\sigma \in C^2(\mathbb{R}^d;\mathbb{R}^{d\times m})$满足：

1. 多项式增长： $|G(x)| + \|\sigma(x)\| \le C(1+|x|^p)$ 对于某些 C、 $p > 0$成立。
2. 局部利普希茨连续： G 和 σ 均为局部利普希茨连续。

假设 2.2 (一致椭圆性**)。** 扩散张量 $a(x) = \sigma(x)\sigma(x)^\top$ 满足

$$\inf_{x\in\Omega}\inf_{|\xi|=1} \xi^\top a(x)\xi \ge \nu > 0. \tag{6}$$

假设 2.3 (边界条件**)。** 除非另有说明，我们考虑狄利克雷问题： $h = \psi$ 在 $\partial\Omega$ 上，给定边界数据 $\psi \in C(\partial\Omega)$。对于无界区域，我们假设 $h(x) \to 0$ 当 $|x| \to \infty$时成立。对于周期区域，我们要求 h 满足与该区域相同的周期性。

在假设 2.1 下，对于任意初始条件，随机微分方程 (1) 都有唯一的强解。假设 2.2 确保 Koopman 偏微分方程是一致椭圆的，这对核等价至关重要。

2.3 线性–非线性分解

按照 $[1,16],$，我们将平衡点（取为 $x = 0$）处的漂移项分解为：

$$G(x) = Ax + F(x), \quad A = \frac{\partial G}{\partial x}(0), \quad F(x) = G(x) - Ax. \tag{7}$$

Koopman 特征函数可分解为

$$\phi(x) = w^\top x + h(x), \tag{8}$$

其中， w 是 A 的左特征向量，对应特征值 λ（即 $w^\top A = \lambda w^\top$）； h（x）是非线性修正。

定理 2.4 （非线性修正项的偏微分方程）。 若 w 是 A 的左特征向量，对应特征值λ，则 h（x）满足

$$G(x)\cdot\nabla h(x) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left[a(x)\nabla^2 h(x)\right] - \lambda h(x) = -w^\top F(x). \tag{9}$$

证明。 通过将分解 $\phi = w^\top x + h$ 代入 Koopman特征函数方程 $\mathcal{K}\phi = \lambda\phi$，我们推导出 $h(x)$ 的偏微分方程。

步骤 1：计算 $\mathcal{K}(w^\top x)$。 首先，我们计算 Koopman 生成元对线性项 $w^\top x$ 的作用：

$$\mathcal{K}(w^\top x) = G(x)\cdot\nabla(w^\top x) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a(x)\nabla^2(w^\top x)]. \tag{10}$$

由于 $w^\top x$关于 x 是线性的：

- $\nabla(w^\top x) = w$
- $\nabla^2(w^\top x) = 0$ （线性函数的海森矩阵为零）

因此:

$$\mathcal{K}(w^\top x) = G(x) \cdot w = w^\top G(x). \tag{11}$$

步骤 2：使用 G 的线性-非线性分解。 回想一下 $G(x) = Ax + F(x)$，其中 $A = \frac{\partial G}{\partial x}(0)$，而 $F(x) = G(x) - Ax$ 是纯非线性部分。因此:

$$w^\top G(x) = w^\top (Ax + F(x)) = w^\top Ax + w^\top F(x). \tag{12}$$

由于 w 是 A 的左特征向量，对应特征值为 λ （即 $w^\top A = \lambda w^\top$）：

$$w^\top Ax = (w^\top A)x = \lambda w^\top x. \tag{13}$$

因此:

$$\mathcal{K}(w^\top x) = \lambda w^\top x + w^\top F(x). \tag{14}$$

步骤 3：计算 $\mathcal{K}h(x)$。 非线性修正 $h(x)$的贡献为:

$$\mathcal{K}h(x) = G(x) \cdot \nabla h(x) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a(x)\nabla^2 h(x)]. \tag{15}$$

步骤 4：利用 $\mathcal{K}$ 的线性性。由于库普曼生成元是线性的:

$$\mathcal{K}\phi = \mathcal{K}(w^\top x + h) = \mathcal{K}(w^\top x) + \mathcal{K}h \tag{16}$$

$$= \lambda w^\top x + w^\top F(x) + G(x) \cdot \nabla h(x) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a(x)\nabla^2 h(x)]. \tag{17}$$

步骤 5：应用特征函数方程。特征函数方程 $\mathcal{K}\phi = \lambda\phi$要求:

$$\mathcal{K}\phi = \lambda\phi = \lambda(w^\top x + h) = \lambda w^\top x + \lambda h. \tag{18}$$

S步骤 6：令两边相等并化简。 令步骤 4 和步骤 5 中的表达式相等:

$$\lambda w^\top x + w^\top F(x) + G(x) \cdot \nabla h(x) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a(x)\nabla^2 h(x)] = \lambda w^\top x + \lambda h(x). \tag{19}$$

将两边的 $\lambda w^\top x$ 消去并重新整理:

$$G(x) \cdot \nabla h(x) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a(x)\nabla^2 h(x)] - \lambda h(x) = -w^\top F(x). \tag{20}$$

这正是方程（9）。 □

方程（9）是一个线性二阶椭圆型偏微分方程，其具有:

- 漂移系数 $G(x)$
- 扩散系数 $a(x)/2$
- 势/折扣率 λ
- 源项 $-w^\top F(x)$

注 2.5 (确定性极限)。 当 $\sigma \equiv 0$ 时，方程 (9) 化简为

$$f(x) \cdot \nabla h(x) - \lambda h(x) = -w^\top F(x), \tag{21}$$

这正是确定性框架 *[1]* 中的同调方程。

3 随机核构造

现在，我们将这三种核构造推广到随机情形。

3.1 带扩散的 Lions 型变分原理

定义随机输运算子

$$L_{\text{stoch}}\phi(x) := G(x)\cdot\nabla\phi(x) + \frac{1}{2}\text{Tr}[a(x)\nabla^2\phi(x)] - \lambda\phi(x). \tag{22}$$

变分表述旨在使 $h \in \mathcal{H}_k$ 最小化

$$J[h] = \|L_{\text{stoch}}h + w^\top F\|^2_{L^2(\Omega)} + \gamma\|h\|^2_{\mathcal{H}_k}, \tag{23}$$

其中，$\gamma > 0$ 是正则化参数。

与确定性情形不同，现在的变分泛函涉及二阶导数。这要求核具有二阶导数再生性质。

定义 3.1（随机问题的容许核）。若核 $k : \Omega \times \Omega \to \mathbb{R}$ 是随机 Koopman 问题的容许核，需满足：

(i) $k \in C^{2,2}(\Omega \times \Omega)$（对每个自变量均二阶连续可微）

(ii) 再生核希尔伯特空间 $\mathcal{H}_k$ 满足 $\mathcal{H}_k \hookrightarrow C^2(\Omega)$

(iii) 对所有 $h \in \mathcal{H}_k$ 和 $y \in \Omega$：

$$h(y) = \langle h, k(\cdot, y)\rangle_{\mathcal{H}_k}, \tag{24}$$

$$\frac{\partial h}{\partial x_i}(y) = \langle h, \frac{\partial k}{\partial y_i}(\cdot, y)\rangle_{\mathcal{H}_k}, \tag{25}$$

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x_i \partial x_j}(y) = \langle h, \frac{\partial^2 k}{\partial y_i \partial y_j}(\cdot, y)\rangle_{\mathcal{H}_k}. \tag{26}$$

示例 3.2 (容许核**)**。以下核均为容许核：

1. 高斯径向基函数：$k(x, y) = \exp(-\|x - y\|^2/(2\ell^2))$ – 无限次可微。*2.* ***Matérn***，具有 $\nu > d/2 + 2$：确保样本路径 C^2。*3.* 多项式核：$k(x, y) = (1 + x \cdot y)^p$ 对于 $p \geq 2$ – 有限次可微。

变分核定义为 Riesz 表示元：

定义 3.3 (变分核**)**。变分核 $k_{\text{var}}(x, y)$ 由以下性质定义：对所有 $h \in \mathcal{H}_k$：

$$h(y) = \langle h, k_{\text{var}}(\cdot, y)\rangle_{\mathcal{H}}, \tag{27}$$

其中 $\mathcal{H}$ 是 $C^\infty(\Omega)$ 在图范数下的完备化

$$\|u\|^2_{\mathcal{H}} = \|u\|^2_{L^2(\Omega)} + \|L_{\text{stoch}}u\|^2_{L^2(\Omega)}. \tag{28}$$

3.2 通过 Feynman–Kac 公式构造格林函数

对于确定性系统，格林函数沿特征线构造。对于随机系统，Feynman–Kac 公式提供了类似的构造方法。

定理 3.4 (Feynman–Kac 公式**)**。设 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ 为有界区域。令 $\tau_\Omega := \inf\{t \geq 0 : X_t \notin \Omega\}$ 为首次离开时间。对于偏微分方程

$$(\lambda - \mathcal{K})u = g \quad \text{in } \Omega, \qquad u = \psi \quad \text{on } \partial\Omega, \tag{29}$$

对于有界的 g 和连续的 ψ，解为

$$u(x) = \mathbb{E}_x\left[e^{-\lambda\tau_\Omega}\psi(X_{\tau_\Omega}) + \int_0^{\tau_\Omega} e^{-\lambda t}g(X_t)\,\mathrm{d}t\right]. \tag{30}$$

证明。 我们分几个步骤给出完整证明。

步骤 1：折现过程的伊藤公式。定义过程 $Y_t = e^{-\lambda t}u(X_t)$ 。将伊藤公式应用于 Y_t:

$$
\begin{aligned}
dY_t &= d(e^{-\lambda t}u(X_t)) && (31)\\
&= -\lambda e^{-\lambda t}u(X_t)\,\mathrm{d}t + e^{-\lambda t}du(X_t) && (32)\\
&= -\lambda e^{-\lambda t}u(X_t)\,\mathrm{d}t + e^{-\lambda t}\left[\nabla u(X_t)^\top dX_t + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a(X_t)\nabla^2 u(X_t)]\,\mathrm{d}t\right]. && (33)
\end{aligned}
$$

代入 $dX_t = G(X_t)\,\mathrm{d}t + \sigma(X_t)dW_t$:

$$
\begin{aligned}
dY_t &= e^{-\lambda t}\left[-\lambda u(X_t) + G(X_t)\cdot\nabla u(X_t) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a(X_t)\nabla^2 u(X_t)]\right]\mathrm{d}t && (34)\\
&\quad + e^{-\lambda t}\nabla u(X_t)^\top\sigma(X_t)dW_t && (35)\\
&= e^{-\lambda t}\left[(\mathcal{K}-\lambda)u(X_t)\right]\mathrm{d}t + e^{-\lambda t}\nabla u(X_t)^\top\sigma(X_t)dW_t. && (36)
\end{aligned}
$$

Step 2：利用偏微分方程。 由于 u 满足 $(\lambda - \mathcal{K})u = g$，我们有 $(\mathcal{K}-\lambda)u = -g$，因此 ：

$$
dY_t = -e^{-\lambda t}g(X_t)\,\mathrm{d}t + e^{-\lambda t}\nabla u(X_t)^\top\sigma(X_t)dW_t. \tag{37}
$$

步骤 3：积分与停止。 从 0 积分到 $t\wedge\tau_\Omega$ （ t 与退出时间的最小值）：

$$
Y_{t\wedge\tau_\Omega} - Y_0 = -\int_0^{t\wedge\tau_\Omega} e^{-\lambda s}g(X_s)\,\mathrm{d}s + \int_0^{t\wedge\tau_\Omega} e^{-\lambda s}\nabla u(X_s)^\top\sigma(X_s)dW_s. \tag{38}
$$

由于 $Y_0 = u(X_0) = u(x)$:

$$
e^{-\lambda(t\wedge\tau_\Omega)}u(X_{t\wedge\tau_\Omega}) = u(x) - \int_0^{t\wedge\tau_\Omega} e^{-\lambda s}g(X_s)\,\mathrm{d}s + M_{t\wedge\tau_\Omega}, \tag{39}
$$

其中 $M_t = \int_0^t e^{-\lambda s}\nabla u(X_s)^\top\sigma(X_s)dW_s$ 是一个局部鞅。

步骤 4：取期望。 在我们的正则性假设（有界 Ω、 C^2 边界、光滑系数）下， $M_{t\wedge\tau_\Omega}$ 是满足 $\mathbb{E}_x[M_{t\wedge\tau_\Omega}] = 0$ 的真鞅。这是因为:

- ∇u 凭借 u 的正则性在 Ω 上有界，_
- σ 在紧集 Ω 上有界,
- 因此被积函数有界，从而使 M_t 成为真鞅。

取期望:

$$
\mathbb{E}_x\left[e^{-\lambda(t\wedge\tau_\Omega)}u(X_{t\wedge\tau_\Omega})\right] = u(x) - \mathbb{E}_x\left[\int_0^{t\wedge\tau_\Omega} e^{-\lambda s}g(X_s)\,\mathrm{d}s\right]. \tag{40}
$$

步骤 5：极限为 $t\to\infty$。 对于具有一致椭圆性的有界区域（假设 2.2），$\tau_\Omega < \infty$ 几乎必然成立，且 $\mathbb{E}_x[\tau_\Omega] < \infty$。由于 $t\to\infty$， $t\wedge\tau_\Omega \to \tau_\Omega$ 几乎必然成立。通过控制收敛（利用 u 、 g 的有界性，以及 $e^{-\Re(\lambda)t}$ 对于 $\Re$（λ） > 0 的可积性）：

$$
\mathbb{E}_x\left[e^{-\lambda\tau_\Omega}u(X_{\tau_\Omega})\right] = u(x) - \mathbb{E}_x\left[\int_0^{\tau_\Omega} e^{-\lambda s}g(X_s)\,\mathrm{d}s\right]. \tag{41}
$$

由于 $u = \psi$ 在 $\partial\Omega$ 上成立，因此我们有 $u(X_{\tau_\Omega}) = \psi(X_{\tau_\Omega})$。整理得:

$$
u(x) = \mathbb{E}_x\left[e^{-\lambda\tau_\Omega}\psi(X_{\tau_\Omega}) + \int_0^{\tau_\Omega} e^{-\lambda t}g(X_t)\,\mathrm{d}t\right]. \tag{42}
$$

至此，证明完成。 □

将此应用于非线性修正方程（9）：

推论 y 3.5 （ h 的 Feynman–Kac 表示）。 非线性修正 $h(x)$ 满足

$$h(x) = \mathbb{E}_x \left[e^{-\lambda \tau_\Omega} \psi(X_{\tau_\Omega}) + \int_0^{\tau_\Omega} e^{-\lambda t} w^\top F(X_t)\, \mathrm{d}t \right], \tag{43}$$

其中， ψ 是 $\partial\Omega$ 上的边界条件。

证明。 非线性修正 $h(x)$ 满足偏微分方程 (9)：

$$G(x) \cdot \nabla h(x) + \frac{1}{2} \mathrm{Tr}[a(x) \nabla^2 h(x)] - \lambda h(x) = -w^\top F(x), \tag{44}$$

这可以改写为

$$(\lambda - \mathcal{K}) h(x) = w^\top F(x). \tag{45}$$

这正是定理 3.4 所要求的形式，其中 $g(x) = w^\top F(x)$。应用 Feynman–Kac 公式 (30) 即可得到 (43)。 □

随机算子的格林函数与转移密度相关：

定义 3.6 （随机格林函数）。 含时格林函数 $G_\lambda(x, y;\ t)$ 满足

$$(\partial_t - \mathcal{K} + \lambda) G_\lambda(x, y; t) = \delta(x - y)\delta(t), \tag{46}$$

并且与该随机微分方程的转移密度 $p_t(x, y)$ 相关，满足

$$G_\lambda(x, y; t) = e^{-\lambda t} p_t(x, y). \tag{47}$$

定义 3.7 （Feynman–Kac 核）。 *Feynman–Kac* 核是时间积分格林函数：

$$k_{\mathrm{FK}}(x, y) = \int_0^\infty G_\lambda(x, y; t)\, \mathrm{d}t = \int_0^\infty e^{-\lambda t} p_t(x, y)\, \mathrm{d}t. \tag{48}$$

注 3.8 （概率解释）。 *Feynman–Kac* 核 $k_{\mathrm{FK}}(x, y)$ 可以解释为：从 x出发的轨迹在 y 处的期望贴现局部时间：

$$k_{\mathrm{FK}}(x, y) = \mathbb{E}_x \left[\int_0^\infty e^{-\lambda t} \delta(y - X_t)\, \mathrm{d}t \right]. \tag{49}$$

3.3 随机预解核

Koopman 生成元的预解式自然地扩展到随机情形：

定义 3.9 (随机预解式)。 对于 λ，其中 $\Re(\lambda) > 0$，预解算子 is

$$R_\lambda = (\lambda I - \mathcal{K})^{-1}. \tag{50}$$

命题 3.10 (拉普拉斯变换表示)。 预解式可表示为

$$R_\lambda[f](x) = \int_0^\infty e^{-\lambda t} [U_t f](x)\, \mathrm{d}t = \mathbb{E}_x \left[\int_0^\infty e^{-\lambda t} f(X_t)\, \mathrm{d}t \right]. \tag{51}$$

证明。 我们通过证明右侧满足预解式的定义性质来验证该公式。

步骤 1：良定义性。对于 $\Re(\lambda) > 0$ 和有界的 f，积分

$$\int_0^\infty e^{-\lambda t} [U_t f](x)\, \mathrm{d}t \tag{52}$$

绝对收敛，因为 $|U_t f(x)| \le \|f\|_\infty$ 且 $\int_0^\infty e^{-\Re(\lambda)t}\,\mathrm{d}t = 1/\Re(\lambda) < \infty$。

步骤 2：半群性质。 根据半群性质 $U_{t+s} = U_t U_s$，库普曼生成元满足

$$\mathcal{K} f = \lim_{t\to 0^+} \frac{U_t f - f}{t}. \tag{53}$$

步骤 3：验证。 定义 $g(x) := \int_0^\infty e^{-\lambda t}[U_t f](x)\,\mathrm{d}t$。我们证明 $(\lambda I - \mathcal{K})g = f$：

$$(\lambda I - \mathcal{K})g(x) = \lambda g(x) - \lim_{s\to 0^+} \frac{U_s g(x) - g(x)}{s} \tag{54}$$

$$= \lambda g(x) - \lim_{s\to 0^+} \frac{1}{s}\left[\int_0^\infty e^{-\lambda t} U_{t+s} f(x)\,\mathrm{d}t - \int_0^\infty e^{-\lambda t} U_t f(x)\,\mathrm{d}t\right]. \tag{55}$$

在第一个积分中作变量替换 $u = t + s$：

$$= \lambda g(x) - \lim_{s\to 0^+} \frac{1}{s}\left[\int_s^\infty e^{-\lambda(u-s)} U_u f(x)\,du - \int_0^\infty e^{-\lambda t} U_t f(x)\,\mathrm{d}t\right] \tag{56}$$

$$= \lambda g(x) - \lim_{s\to 0^+} \frac{1}{s}\left[e^{\lambda s}\int_s^\infty e^{-\lambda u} U_u f(x)\,du - \int_0^\infty e^{-\lambda t} U_t f(x)\,\mathrm{d}t\right]. \tag{57}$$

写作 $\int_s^\infty = \int_0^\infty - \int_0^s$ 并利用泰勒展开 $e^{\lambda s} = 1 + \lambda s + O(s^2)$：

$$= \lambda g(x) - \lim_{s\to 0^+} \frac{1}{s}\left[(1+\lambda s)\left(g(x) - \int_0^s e^{-\lambda t} U_t f(x)\,\mathrm{d}t\right) - g(x) + O(s^2)\right] \tag{58}$$

$$= \lambda g(x) - \lim_{s\to 0^+} \left[\lambda g(x) - \frac{1}{s}\int_0^s e^{-\lambda t} U_t f(x)\,\mathrm{d}t + O(s)\right] \tag{59}$$

$$= \lim_{s\to 0^+} \frac{1}{s}\int_0^s e^{-\lambda t} U_t f(x)\,\mathrm{d}t = U_0 f(x) = f(x), \tag{60}$$

其中最后一步用到了被积函数的连续性和微积分基本定理。**步骤 4：概率形式**。 由于 $U_t f(x) = \mathbb{E}_x[f(X_t)]$,，根据富比尼定理：

$$R_\lambda[f](x) = \int_0^\infty e^{-\lambda t}\mathbb{E}_x[f(X_t)]\,\mathrm{d}t = \mathbb{E}_x\left[\int_0^\infty e^{-\lambda t} f(X_t)\,\mathrm{d}t\right]. \tag{61}$$

□

定义 3.11 (修正的预解核)。 对于 $\lambda \in \mathbb{C}$ 满足 $\Re(\lambda) > 0$：

(a) 具有狄利克雷条件的有界区域：设 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ 是一个有界区域，并且

$$\tau_\Omega := \inf\{t \ge 0 : X_t \notin \Omega\}$$

是首次离开时间。预解核为

$$k_{\mathrm{res}}(x,y) = \mathbb{E}_x\left[\int_0^{\tau_\Omega} e^{-\lambda t}\delta(y - X_t)\,\mathrm{d}t\right]. \tag{62}$$

(b) 无界区域或周期边界条件：对于 $\Omega = \mathbb{R}^d$ 或具有周期边界条件（此时轨迹始终停留在 Ω内），预解核为

$$k_{\mathrm{res}}(x,y) = R_\lambda[\delta_y](x) = \mathbb{E}_x\left[\int_0^\infty e^{-\lambda t}\delta(y - X_t)\,\mathrm{d}t\right]. \tag{63}$$

注释3.12 (与 Feynman–Kac 一致)。 定义 *3.11(a)* 与 *Feynman–Kac* 表示一致：二者都使用退出时间 τ_Ω 作为积分上限。指数折扣因子 $e^{-\lambda t}$ *with* $\Re(\lambda) > 0$ 确保了收敛，即使 $\tau_\Omega = \infty$（如情形 ***(b)*** 中）也是如此，因为对于有界的 f：

$$\left|\mathbb{E}_x\left[\int_0^\infty e^{-\lambda t} f(X_t)\,\mathrm{d}t\right]\right| \le \frac{\|f\|_\infty}{\Re(\lambda)} < \infty.$$

3.4 核等价定理

现在我们证明这三种随机核构造是等价的。

定理 3.13 (随机微分方程的核等价——修正版)。 在假设 *2.1* 和 *2.2* 下，且对于满足以下条件的 $\lambda \in \mathbb{C}$

$$\Re(\lambda) > \lambda_0 := \frac{1}{2} \sup_{x \in \Omega} |(\nabla \cdot G(x))^-|, \tag{64}$$

其中 $(f)^- := \max(0, -f)$ 表示负部，三种核构造得到相同的再生核：

$$k_{\mathrm{var}}(x, y) = k_{\mathrm{FK}}(x, y) = k_{\mathrm{res}}(x, y). \tag{65}$$

注 3.14 (充分条件)。 一个更简单的充分条件是

$$\Re(\lambda) > \frac{1}{2} \|\nabla \cdot G\|_{L^\infty(\Omega)}, \tag{66}$$

这保证了无论 $\nabla \cdot G$ 的符号如何，强制性都成立。

注 3.15 (不可压缩流)。 当 $\nabla \cdot G = 0$ （不可压缩／无散漂移项）时，条件 (64) 简化为 $\Re(\lambda) > 0$，从而恢复了原始表述。

证明。 我们分三步证明其等价性。

步骤 1： $k_{\mathrm{FK}} = k_{\mathrm{res}}$ **（Feynman–Kac 等于预解式）**。

根据定义 3.7，Feynman–Kac 核为：

$$k_{\mathrm{FK}}(x, y) = \int_0^\infty e^{-\lambda t} p_t(x, y) \, \mathrm{d}t, \tag{67}$$

其中 $p_t(x, y)$ 是随机微分方程 (1) 的转移密度，满足

$$\Pr(X_t \in A \mid X_0 = x) = \int_A p_t(x, y) \, dy. \tag{68}$$

根据定义 3.11，预解核为：

$$k_{\mathrm{res}}(x, y) = \mathbb{E}_x \left[\int_0^\infty e^{-\lambda t} \delta(y - X_t) \, \mathrm{d}t \right]. \tag{69}$$

对于任意测试函数 $\varphi \in C_c(\mathbb{R}^d)$：

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^d} k_{\mathrm{res}}(x, y) \varphi(y) \, dy &= \mathbb{E}_x \left[\int_0^\infty e^{-\lambda t} \int_{\mathbb{R}^d} \delta(y - X_t) \varphi(y) \, dy \, \mathrm{d}t \right] && (70)\\
&= \mathbb{E}_x \left[\int_0^\infty e^{-\lambda t} \varphi(X_t) \, \mathrm{d}t \right] && (71)\\
&= \int_0^\infty e^{-\lambda t} \mathbb{E}_x[\varphi(X_t)] \, \mathrm{d}t \quad \text{(by Fubini)} && (72)\\
&= \int_0^\infty e^{-\lambda t} \int_{\mathbb{R}^d} p_t(x, y) \varphi(y) \, dy \, \mathrm{d}t && (73)\\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \left(\int_0^\infty e^{-\lambda t} p_t(x, y) \, \mathrm{d}t \right) \varphi(y) \, dy && (74)\\
&= \int_{\mathbb{R}^d} k_{\mathrm{FK}}(x, y) \varphi(y) \, dy. && (75)
\end{aligned}$$

由于这对所有测试函数 φ 都成立，因此我们有 $k_{\mathrm{res}}(x, y) = k_{\mathrm{FK}}(x, y)$。

步骤 2：变分表述。

定义带有图范数的希尔伯特空间 $\mathcal{H}$：

$$\|u\|_{\mathcal{H}}^2 = \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|(\lambda - \mathcal{K})u\|_{L^2(\Omega)}^2. \tag{76}$$

变分核 $k_{\text{var}}(x,\ y)$ 定义为 $\mathcal{H}$ 中点求值的 Riesz 表示元。也就是说，对于每个 $y \in \Omega$，$k_{\text{var}}(\cdot,\ y) \in \mathcal{H}$ 满足：

$$u(y) = \langle u, k_{\text{var}}(\cdot, y)\rangle_{\mathcal{H}}, \quad \forall u \in \mathcal{H}. \tag{77}$$

根据再生核希尔伯特空间理论，$k_{\text{var}}(\cdot,\ y)$ 可表征为以下问题的解：

$$(I + (\lambda - \mathcal{K})^*(\lambda - \mathcal{K}))k_{\text{var}}(\cdot, y) = \delta_y, \tag{78}$$

在分布意义下。对于一致椭圆算子，这可以简化为：变分表示元满足

$$(\lambda^* - \mathcal{K}^*)k_{\text{var}}(\cdot, y) = \delta_y \quad \text{in } \Omega. \tag{79}$$

步骤 3： $k_{\text{var}} = k_{\text{res}}$ **（变分核等于预解式）–已更正。**

在一致椭圆性（假设 2.2）下，算子 $\mathcal{K}$（定义域为 $D(\mathcal{K}) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$）在 $L^2(\Omega)$ 上生成一个强连续半群 $\{U_t\}$。伴随算子 $\mathcal{K}^*$ 是 Kolmogorov 正向（Fokker–Planck）算子：

$$\mathcal{K}^* v = -\nabla \cdot (Gv) + \frac{1}{2}\sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}(a_{ij} v). \tag{80}$$

伴随预解算子为：

$$R_{\lambda^*}^* = (\lambda^* I - \mathcal{K}^*)^{-1}. \tag{81}$$

由对偶性，预解核（视为第一变量的函数，且 y固定）满足：

$$k_{\text{res}}(\cdot, y) = R_\lambda[\delta_y](\cdot), \tag{82}$$

这意味着

$$(\lambda I - \mathcal{K})k_{\text{res}}(\cdot, y) = \delta_y. \tag{83}$$

现在，转移密度 $p_t(x, y)$关于不变测度在时间反演下是对称的（细致平衡）。更精确地说，对于伴随半群：

$$k_{\text{res}}(x, y) = \int_0^\infty e^{-\lambda t} p_t(x, y)\, \mathrm{d}t = \int_0^\infty e^{-\lambda^* t} p_t^*(y, x)\, \mathrm{d}t, \tag{84}$$

其中 p_t^* 是伴随转移密度。

关键观察是，$k_{\text{var}}(\cdot, y)$与 $k_{\text{res}}(\cdot, y)$都求解同一个偏微分方程：

$$(\lambda - \mathcal{K})k(\cdot, y) = \delta_y \quad \text{in } \Omega. \tag{85}$$

在一致椭圆性下，算子 $\lambda I - \mathcal{K}$ 为：

1. **强制的（已更正）：** 对于 $u \in H_0^1(\Omega)$，我们逐项计算 $\langle \mathcal{K}u,\ u\rangle_{L^2}$。

扩散项：使用 $u|_{\partial\Omega} = 0$ 进行分部积分：

$$\Re\left\langle \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a\nabla^2 u], u \right\rangle = -\frac{1}{2}\int_\Omega \nabla u^\top a(x) \nabla u\, dx \le -\frac{\nu}{2}\|\nabla u\|_{L^2}^2, \tag{86}$$

其中，该不等式使用了一致椭圆性 $a(x) \ge \nu I$（假设 2.2）。

漂移项（此前省略）：对于 $u \in H_0^1(\Omega)$：

$$\langle G \cdot \nabla u, u \rangle = \int_\Omega (G(x) \cdot \nabla u(x)) u(x)\, dx = \frac{1}{2} \int_\Omega G(x) \cdot \nabla (u^2(x))\, dx. \tag{87}$$

对 $u|_{\partial\Omega} = 0$ 进行分部积分：

$$= -\frac{1}{2} \int_\Omega (\nabla \cdot G(x)) u^2(x)\, dx. \tag{88}$$

因此：

$$-\Re\langle G \cdot \nabla u, u \rangle = \frac{1}{2} \int_\Omega (\nabla \cdot G(x)) |u(x)|^2\, dx. \tag{89}$$

修正后的强制性估计：合并漂移项和扩散项的贡献：

$$\begin{aligned} \Re\langle (\lambda - \mathcal{K})u, u \rangle &= \Re(\lambda) \|u\|_{L^2}^2 - \Re\langle \mathcal{K}u, u \rangle \\ &= \Re(\lambda) \|u\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \int_\Omega (\nabla \cdot G) |u|^2\, dx + \frac{1}{2} \int_\Omega \nabla u^\top a \nabla u\, dx. \end{aligned} \tag{90}$$

为了对漂移散度项进行估计：

$$\frac{1}{2} \int_\Omega (\nabla \cdot G) |u|^2\, dx \geq -\frac{1}{2} \|(\nabla \cdot G)^-\|_{L^\infty} \|u\|_{L^2}^2. \tag{91}$$

因此，**修正后的强制性估计**为：

$$\boxed{\Re\langle (\lambda - \mathcal{K})u, u \rangle \geq \left(\Re(\lambda) - \frac{1}{2} \|(\nabla \cdot G)^-\|_{L^\infty} \right) \|u\|_{L^2}^2 + \frac{\nu}{2} \|\nabla u\|_{L^2}^2.} \tag{92}$$

在条件 $\Re(\lambda) > \lambda_0 := \frac{1}{2} \|(\nabla \cdot G)^-\|_{L^\infty}$ 下，强制性得以成立。

2. **可逆性**：根据 Lax–Milgram定理，$\lambda I - \mathcal{K}$ 是从 $H_0^1(\Omega)$ 到 $H^{-1}(\Omega)$ 的双射。
3. **格林函数的唯一性**：方程 $(\lambda - \mathcal{K})G(\cdot, y) = \delta_y$ 在适当的分布意义下有唯一解。

因此，根据一致椭圆算子的格林函数唯一性，我们得出：

$$k_{\text{var}}(x, y) = k_{\text{res}}(x, y). \tag{93}$$

结合步骤 1–3，我们已经证明：

$$k_{\text{var}}(x, y) = k_{\text{FK}}(x, y) = k_{\text{res}}(x, y). \tag{94}$$

□

备注 3.16（椭圆性的作用——扩展）。一致椭圆性假设对于等价定理至关重要。若没有这一假设：

- 变分问题可能不是强制的。
- 格林函数可能不存在，也可能具有高度奇异性。
- 预解式可能无界。

在退化情形下，当 $a(x)$不是满秩时，需要更复杂的分析（亚椭圆性、*Hörmander* 条件）。具体而言，如果扩散向量场与其和漂移项的对易子所生成的李代数在每一点都张成 $\mathbb{R}^d$，亚椭圆正则性理论仍可能推出核等价。

备注 3.17 （与确定性情形的比较——扩展版）。 确定性核统一定理 *[1,定理 3.7]* 需要满足来自特征流的因果条件。在随机情形下：

- 椭圆性取代因果性 成为关键的结构性假设。
- 漂移散度条件 $\Re(\lambda) > \frac{1}{2}\|(\nabla \cdot G)^-\|_{L^\infty}$ 在确定性情形中没有直接对应的条件；在该情形下，对于带有 $\Re(\lambda) > 0$ 的输运算子，强制性是自动成立的。
- 物理解释： 该条件可防止漂移项将“概率推入”区域的速度快于折扣率 λ 使其消散的速度。

备注 3.18 (替代方案：图范数方法)。 若希望避免条件 (64)，一种替代方案是直接使用图范数。在这种情况下：

- 变分核定义为在 $\mathcal{H}$ 中、关于图范数的 *Riesz* 表示元。
- 强制性由定义自动满足：$\|u\|_{\mathcal{H}}^2 = \|u\|_{L^2}^2 + \|(\lambda - \mathcal{K})u\|_{L^2}^2 \geq \|u\|_{L^2}^2$。
- 等价性 $k_{\text{var}} = k_{\text{res}}$ 可由证明两个核在 $\mathcal{H}$中满足相同的弱形式得出。

这种方法更为抽象，但避免了对 λ施加显式条件。

3.5 亚椭圆扩展

迄今发展的核-PDE框架可以扩展到满足H¨ormander亚椭圆性条件的退化扩散。在此情形下，尽管扩散矩阵是奇异的，生成元 $\mathcal{K}$ 仍具有光滑的基本解。我们构造相应的图空间 $\mathcal{H}_\lambda$：$= \{u \in L^2 : (\lambda - \mathcal{K})u \in L^2\}$，并证明三种核表示（预解式、变分、Feynman–Kac）仍然等价。次椭圆正则性从H^1 （椭圆情形）降至 H^ε，其中 $\varepsilon = (2r+1)^{-1}$，且 r 为李括号深度。对于 $\varepsilon > d/2$，再生核希尔伯特空间（RKHS）结构仍然成立；否则，则需要使用光滑化点求值。这一推广适用于欠阻尼朗之万动力学等动力学模型。完整证明和数值方面的影响详见附录A–D。

4 计算方法

现在，我们将开发用于近似随机Koopman特征函数的计算方法。

4.1 配点法

给定 N 配点 $\{x_i\}_{i=1}^N \subset \Omega$，我们近似

$$h(x) \approx \sum_{j=1}^{N} \alpha_j k(x, x_j). \tag{95}$$

在配点处施加偏微分方程 (9)，得到：

$$(\mathbf{L} + \mathbf{D} - \lambda \mathbf{K})\boldsymbol{\alpha} = -\mathbf{f}, \tag{96}$$

其中矩阵为：

核格拉姆矩阵。

$$K_{ij} = k(x_i, x_j). \tag{97}$$

漂移矩阵。

$$L_{ij} = G(x_i) \cdot \nabla_x k(x_i, x_j) = \sum_{r=1}^{d} G_r(x_i) \frac{\partial k}{\partial x_r}(x_i, x_j). \tag{98}$$

扩散矩阵。

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \mathrm{Tr}\left[a(x_i) \nabla_x^2 k(x_i, x_j)\right] = \frac{1}{2} \sum_{r,s=1}^{d} a_{rs}(x_i) \frac{\partial^2 k}{\partial x_r \partial x_s}(x_i, x_j). \tag{99}$$

源向量。

$$f_i = w^\top F(x_i). \tag{100}$$

注4.1（确定性极限）。当 $\sigma \equiv 0$ 时，我们有 $a \equiv 0$，因此 $\mathbf{D} = 0$。系统（96）化简为

$$(\mathbf{L} - \lambda \mathbf{K})\boldsymbol{\alpha} = -\mathbf{f}, \tag{101}$$

从 *[1]* 恢复确定性配置点系统。

注4.2（配置点选择）。误差界取决于填充距离 $h_{\mathrm{fill}} = \sup_{x \in \Omega} \min_i |x - x_i|$。对于基于网格的采样不可行的高维问题：

- 拟随机序列（*Sobol*、*Halton*）可实现 $h_{\text{填充距离}} = O(N^{-1/d}(\log N)^{d-1})$，其中 $d \leq 20$。
- 稀疏网格（*Smolyak*构造）可缓解平滑函数的维数灾难。
- 自适应细化 会在偏微分方程残差最大的区域增加点。
- 重要性抽样会在特征函数变化迅速的流形附近集中布点。

4.2 高斯径向基函数的核导数

对于高斯核 $k(x, y) = \exp(-\|x - y\|^2/(2\ell^2))$，我们推导出显式公式。

一阶导数。

$$\frac{\partial k}{\partial x_i}(x, y) = -\frac{x_i - y_i}{\ell^2} k(x, y). \tag{102}$$

二阶导数。

$$\frac{\partial^2 k}{\partial x_i \partial x_j}(x, y) = \left[\frac{(x_i - y_i)(x_j - y_j)}{\ell^4} - \frac{\delta_{ij}}{\ell^2}\right] k(x, y). \tag{103}$$

海森矩阵。

$$\nabla_x^2 k(x, y) = \left[\frac{1}{\ell^4}(x - y)(x - y)^\top - \frac{1}{\ell^2} I_d\right] k(x, y). \tag{104}$$

扩散矩阵元素。使用（99）和（104）：

$$D_{ij} = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left[a(x_i)\nabla_x^2 k(x_i, x_j)\right] = \frac{k(x_i, x_j)}{2}\left[\frac{(x_i - x_j)^\top a(x_i)(x_i - x_j)}{\ell^4} - \frac{\mathrm{Tr}[a(x_i)]}{\ell^2}\right]. \tag{105}$$

注记 4.3 （计算复杂度）。 计算扩散矩阵需要:

- O（N^2） 次核函数求值
- O（d^2） 次运算（海森矩阵迹的每个条目）
- 总计： O（N^2d^2） 次运算，在 d较大时占主导

注记 4.4 （高维尺度扩展）。 对于 $d \gg 1$，计算完整海森矩阵迹$\mathrm{Tr}[a\nabla^2 k]$的代价为每个矩阵条目 O（d^2）。当 a（x） 不是对角线时，***Hutchinson*** 迹估计器 可使用 M 个随机探测向量将其降至 O（Md）:

$$\mathrm{Tr}[a(x_i)\nabla_x^2 k(x_i, x_j)] \approx \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} z_m^\top [a(x_i)\nabla_x^2 k(x_i, x_j)] z_m, \tag{106}$$

其中 $z_m \sim \mathcal{N}$（0， I_d） 或*Rademacher*向量（$z_m \in \{-1, +1\}^d$均匀分布）。这使得能够扩展到高维随机微分方程，同时将迹估计的方差保持为 O（$1/\sqrt{M}$） 。

4.3 蒙特卡罗Feynman–Kac近似

当无法获得闭式表达式时，我们使用(43)的蒙特卡洛估计。

算法 1 蒙特卡洛Feynman–Kac估计 需要：初始点 x，漂移项 G，扩散 σ，特征值 λ，特征向量 w需要：区域 Ω，边界条件 ψ，路径数 K，时间步长 Δt1：对于 $k = 1, \ldots, K$ 执行 2：初始化 $X_0^{(k)} = x$， $I^{(k)} = 0$， $t = 0$3：当 $X_t^{(k)} \in \Omega$ 时执行 4：$I^{(k)} \leftarrow I^{(k)} + e^{-\lambda t} w^\top F(X_t^{(k)})\Delta t$5：$X_{t+\Delta t}^{(k)} \leftarrow X_t^{(k)} + G(X_t^{(k)})\Delta t + \sigma(X_t^{(k)})\sqrt{\Delta t}\, Z^{(k)}$ 其中 $Z^{(k)} \sim \mathcal{N}(0, I_m)$ 6：$t \leftarrow t + \Delta t$7：结束当循环 8：$\tau^{(k)} = t$（退出时间） 9：$h^{(k)} = e^{-\lambda\tau^{(k)}}\psi(X_{\tau^{(k)}}^{(k)}) + I^{(k)}$10：结束对于循环 11：返回 $\widehat{h}(x) = \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K} h^{(k)}$

命题 4.5 (蒙特卡洛误差)。 蒙特卡洛估计量 $h(x)$ 满足

$$\mathbb{E}[(\widehat{h}(x) - h(x))^2] = \frac{\mathrm{Var}(h^{(1)}(x))}{K} \le \frac{\sigma_{\mathrm{MC}}^2(x)}{K}, \tag{107}$$

其中 $\sigma_{\mathrm{MC}}^2(x)$ 取决于边界数据、源项和退出时间分布 .

证明。**Step 1：无偏性**。根据 Feynman–Kac 公式（推论 3.5），真实解 tion 是:

$$h(x) = \mathbb{E}_x\left[e^{-\lambda\tau_\Omega}\psi(X_{\tau_\Omega}) + \int_0^{\tau_\Omega} e^{-\lambda t} w^\top F(X_t)\,\mathrm{d}t\right]. \tag{108}$$

每个蒙特卡罗样本 $h^{(k)}$ 都是该期望的一个独立实现：

$$h^{(k)} = e^{-\lambda\tau^{(k)}}\psi(X^{(k)}_{\tau^{(k)}}) + \int_0^{\tau^{(k)}} e^{-\lambda t} w^\top F(X^{(k)}_t)\,\mathrm{d}t. \tag{109}$$

因此，对于每个 k，$\mathbb{E}[h^{(k)}] = h(x)$，且该估计量是无偏的：

$$\mathbb{E}[\widehat{h}(x)] = \mathbb{E}\left[\frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K} h^{(k)}\right] = \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K}\mathbb{E}[h^{(k)}] = h(x). \tag{110}$$

步骤 2：方差计算。由于样本 $h^{(1)}, \ldots, h^{(K)}$ 是独立同分布的：

$$\mathrm{Var}(\widehat{h}(x)) = \mathrm{Var}\left(\frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K} h^{(k)}\right) = \frac{1}{K^2}\sum_{k=1}^{K}\mathrm{Var}(h^{(k)}) = \frac{\mathrm{Var}(h^{(1)})}{K}. \tag{111}$$

步骤 3：均方误差。由于该估计量是无偏的：

$$\mathbb{E}[(\widehat{h}(x) - h(x))^2] = \mathrm{Var}(\widehat{h}(x)) + (\mathbb{E}[\widehat{h}(x)] - h(x))^2 = \mathrm{Var}(\widehat{h}(x)) = \frac{\mathrm{Var}(h^{(1)})}{K}. \tag{112}$$

步骤 4：方差上界。我们可以显式地给出方差 $\sigma^2_{\mathrm{MC}}(x) := \mathrm{Var}(h^{(1)})$ 的上界。使用 $h^{(k)}$ 的公式：

$$\mathrm{Var}(h^{(1)}) \le \mathbb{E}[(h^{(1)})^2] \tag{113}$$

$$= \mathbb{E}\left[\left(e^{-\lambda\tau_\Omega}\psi(X_{\tau_\Omega}) + \int_0^{\tau_\Omega} e^{-\lambda t} w^\top F(X_t)\,\mathrm{d}t\right)^2\right]. \tag{114}$$

根据不等式 $(a+b)^2 \le 2a^2 + 2b^2$：

$$\mathrm{Var}(h^{(1)}) \le 2\mathbb{E}\left[e^{-2\Re(\lambda)\tau_\Omega}\|\psi\|^2_\infty\right] + 2\mathbb{E}\left[\left(\int_0^{\tau_\Omega} e^{-\Re(\lambda)t}|w^\top F(X_t)|\,\mathrm{d}t\right)^2\right]. \tag{115}$$

对于 $\Re(\lambda) > 0$ 且有界的 ψ, F：

$$\sigma^2_{\mathrm{MC}}(x) \le 2\|\psi\|^2_\infty + \frac{2\|w\|^2\|F\|^2_\infty}{\Re(\lambda)^2}. \tag{116}$$

实际方差取决于退出时间分布 τ_Ω 以及轨迹对源项的采样方式 $w^\top F$。

□

4.4 配点法-蒙特卡罗组合方法

对于偏好采用偏微分方程方法，但无法获得闭式导数的问题：

1. 使用算法 1 在配点处生成蒙特卡罗估计 $\widehat{h}(x_i)$。

2. 求解核岭回归：

$$(\mathbf{K} + \eta\mathbf{I})\boldsymbol{\alpha} = \widehat{\mathbf{h}}, \tag{117}$$

   where $\widehat{\mathbf{h}} = (\widehat{h}(x_1), \ldots, \widehat{h}(x_N))^\top$.

3. 近似为 $h(x) \approx \sum_{j=1}^{N} \alpha_j k(x, x_j)$。

4.5 完整算法

算法 2 随机 Koopman 特征函数计算 要求：漂移项 G、扩散 σ、非线性部分 F、特征值 λ、左特征向量 w要求：配点 $\{x_i\}_{i=1}^N$、核 k、正则化 γ1：组装矩阵：2：对于 $i,j=1,\dots,N$，执行 3：$K_{ij}=k(x_i,x_j)$ 4：$L_{ij}=G(x_i)\cdot\nabla_x k(x_i,x_j)$ 5：$D_{ij}=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a(x_i)\nabla_x^2 k(x_i,x_j)]$6：结束循环 7：$f_i=w^\top F(x_i)$，对于 $i=1,\dots,N$8：求解线性方程组：9：$(\mathrm{L}+\mathrm{D}-\lambda\mathrm{K}+\gamma\mathrm{I})\boldsymbol{\alpha}=-\mathrm{f}$ 10：返回：11：$h(x)=\sum_{j=1}^N \alpha_j k(x,x_j)$ 12：$\phi(x)=w^\top x+h(x)$

▷ Eq. (105)

---

5 误差界

我们为随机 Koopman 特征函数近似建立误差界。

5.1 边界稳定性

定理 5.1 (边界稳定性)。设 h 和 $\tilde{h}$ 分别满足带边界条件 ψ 和 $\tilde{\psi}$的(9) 。则对于 $x\in\Omega$：

$$|h(x)-\tilde{h}(x)|\le \mathbb{E}_x[e^{-\Re(\lambda)\tau_\Omega}]\|\psi-\tilde{\psi}\|_{L^\infty(\partial\Omega)}. \tag{118}$$

如果 $\Re(\lambda)\ge 0$:

$$\|h-\tilde{h}\|_{L^\infty(\Omega)}\le \|\psi-\tilde{\psi}\|_{L^\infty(\partial\Omega)}. \tag{119}$$

证明。我们使用 Feynman–Kac 表示来证明稳定性。

Step 1：差值的偏微分方程。函数 h 和 $\tilde{h}$ 在 Ω 中满足相同的偏微分方程 (9)：

$$G(x)\cdot\nabla h+\frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a(x)\nabla^2 h]-\lambda h=-w^\top F(x), \tag{120}$$

$$G(x)\cdot\nabla \tilde{h}+\frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a(x)\nabla^2 \tilde{h}]-\lambda \tilde{h}=-w^\top F(x). \tag{121}$$

因此，差值 $e:=h-\tilde{h}$ 满足：

$$G(x)\cdot\nabla e+\frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a(x)\nabla^2 e]-\lambda e=0\quad\text{in }\Omega, \tag{122}$$

这可以写成：

$$(\lambda-\mathcal{K})e=0\quad\text{in }\Omega. \tag{123}$$

边界条件为：

$$e=h-\tilde{h}=\psi-\tilde{\psi}\quad\text{on }\partial\Omega. \tag{124}$$

步骤 2：差值的 Feynman–Kac 表示。由定理 3.4 应用于齐次方程（其中 $g=0$）可得：

$$e(x)=\mathbb{E}_x\left[e^{-\lambda\tau_\Omega}e(X_{\tau_\Omega})\right]=\mathbb{E}_x\left[e^{-\lambda\tau_\Omega}(\psi-\tilde{\psi})(X_{\tau_\Omega})\right]. \tag{125}$$

这是因为当源项消失时，Feynman–Kac 公式就只剩下边界项。

St第 3 步：逐点界。取绝对值并使用三角不等式：

$$|e(x)| = \left|\mathbb{E}_x\left[e^{-\lambda\tau_\Omega}(\psi-\tilde{\psi})(X_{\tau_\Omega})\right]\right| \tag{126}$$

$$\leq \mathbb{E}_x\left[\left|e^{-\lambda\tau_\Omega}\right|\cdot|(\psi-\tilde{\psi})(X_{\tau_\Omega})|\right] \tag{127}$$

$$\leq \mathbb{E}_x\left[e^{-\Re(\lambda)\tau_\Omega}\right]\cdot\sup_{y\in\partial\Omega}|(\psi-\tilde{\psi})(y)| \tag{128}$$

$$= \mathbb{E}_x\left[e^{-\Re(\lambda)\tau_\Omega}\right]\|\psi-\tilde{\psi}\|_{L^\infty(\partial\Omega)}. \tag{129}$$

这里我们对复数 λ 使用了 $|e^{-\lambda t}| = e^{-\Re(\lambda)t}$。

步骤 4： $\Re(\lambda) \geq 0$ **的一致界**。当 $\Re(\lambda) \geq 0$时，我们有：

$$e^{-\Re(\lambda)\tau_\Omega} \leq e^0 = 1 \quad \text{for all } \tau_\Omega \geq 0. \tag{130}$$

因此：

$$\mathbb{E}_x\left[e^{-\Re(\lambda)\tau_\Omega}\right] \leq 1. \tag{131}$$

由此得到：

$$|e(x)| \leq \|\psi-\tilde{\psi}\|_{L^\infty(\partial\Omega)} \quad \text{for all } x\in\Omega. \tag{132}$$

对 $x \in \Omega$ 取上确界：

$$\|h-\tilde{h}\|_{L^\infty(\Omega)} = \sup_{x\in\Omega}|e(x)| \leq \|\psi-\tilde{\psi}\|_{L^\infty(\partial\Omega)}. \tag{133}$$

步骤 5：解释。该结果是椭圆型偏微分方程极大值原理的随机类比。它表明，当 $\Re(\lambda) \geq 0$ 时，边界数据中的扰动在区域内部不会被放大。对于 $\Re(\lambda) < 0$，指数因子 $e^{-\Re(\lambda)\tau_\Omega}$ 可以大于 1，因此边界扰动可能会被放大，但仅会按由预期退出时间控制的因子放大。

□

5.2 再生核希尔伯特空间近似误差

定理 5.2（再生核希尔伯特空间近似）。设 $h^* \in \mathcal{H}_k$ 为真实解，h_N 为含 N 个点的配置逼近。若核 k 在索博列夫嵌入意义下是 s-光滑的，则：

$$\|h^*-h_N\|_{L^\infty(\Omega)} \leq C\|h^*\|_{\mathcal{H}_k}h_{\text{fill}}^\beta, \tag{134}$$

其中 $h_{\text{fill}} = \sup_{x\in\Omega}\min_i|x-x_i|$ 为填充距离，且 $\beta > 0$ 取决于核的光滑性。

证明。我们利用核插值的幂函数框架建立误差界。

步骤 1：插值算子。设 $\mathcal{I}_N : \mathcal{H}_k \to \mathcal{H}_k$ 为插值算子，它将任意函数 $h \in \mathcal{H}_k$ 映射为其在配点 $\{x_i\}_{i=1}^N$处的插值：

$$\mathcal{I}_N h = \sum_{j=1}^N \alpha_j k(\cdot,x_j), \quad \text{where } (\mathcal{I}_N h)(x_i) = h(x_i) \text{ for } i=1,\dots,N. \tag{135}$$

步骤 2：幂函数。定义幂函数 $P_N : \Omega \to \mathbb{R}^+$ 为：

$$P_N(x) := \sup\left\{|h(x)| : h\in\mathcal{H}_k, \|h\|_{\mathcal{H}_k}\leq 1, h(x_i)=0 \text{ for } i=1,\dots,N\right\}. \tag{136}$$

幂函数衡量每个点处的最坏情况插值误差。它可以显式计算为：

$$P_N(x)^2 = k(x,x) - \mathbf{k}(x)^\top \mathbf{K}^{-1}\mathbf{k}(x), \tag{137}$$

其中 $\mathbf{k}(x) = (k(x, x_1) \dots, k(x, x_N))^\top$，且 $\mathbf{K}$ 是格拉姆矩阵 $K_{ij} = k(x_i, x_j)$。

步骤 3：逐点误差界。对于任意 $h \in \mathcal{H}_k$，插值误差满足：

$$|h(x) - (\mathcal{I}_N h)(x)| \le P_N(x)\|h\|_{\mathcal{H}_k}. \tag{138}$$

这是因为 $h - \mathcal{I}_N h$ 在所有配点处均为零，而幂函数能够界定具有此性质的单位范数函数的取值。

步骤 4：填充距离估计。对于许多光滑核，幂函数满足：

$$\sup_{x\in\Omega} P_N(x) \le C h_{\text{fill}}^{\beta}, \tag{139}$$

其中，指数 β 取决于核的光滑性：

- 对于高斯核：$P_N(x) = O(e^{-c/h_{\text{填充距离}}})$（指数/谱收敛）。
- 对于 Mat´ern-ν 核：$P_N(x) = O(h^{\nu-d/2}$ 填充距离$)$（代数收敛）。
- 对于次数为 p 的多项式核：$P_N(x) = O(h^{p+1}$ 填充距离$)$。

步骤 5：全局误差界。对 $x \in \Omega$ 取上确界：

$$\|h^* - h_N\|_{L^\infty(\Omega)} = \sup_{x\in\Omega} |h^*(x) - h_N(x)| \le \sup_{x\in\Omega} P_N(x)\|h^*\|_{\mathcal{H}_k} \le C\|h^*\|_{\mathcal{H}_k} h_{\text{fill}}^{\beta}. \tag{140}$$

步骤 6：配点与插值。配点逼近 h_N 满足偏微分方程残差方程，而非精确插值。不过，对于经过正则化的适定偏微分方程，随着正则化消失，配点解会收敛到插值，且上述误差界仍然成立，只是常数有所变化 C，该常数取决于配点系统的条件性。

□

常见核的收敛率：

核	收敛速率
高斯	谱（指数）$O(h^{\nu-d/2}$ 填充距离$)$
Mat´ern-ν	
多项式次数 p	$O(h^{p+1}$ 填充距离$)$

5.3 总误差分解

对于配置-蒙特卡洛组合方法：

定理 5.3 (总误差界**)**。设 h^* 为真实解，$\{x_i\}_{i=1}^N$ 为配点，$\widehat{\ }$且 $h(x_i)$为基于 K 个样本的蒙特卡罗估计。核岭回归估计量 h_N满足：

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(\widehat{h}_N(x_i) - h^*(x_i))^2 \le \underbrace{\inf_{u\in\mathcal{H}_k}\left\{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(u(x_i)-h^*(x_i))^2 + \eta\|u\|_{\mathcal{H}_k}^2\right\}}_{RKHS\ approximation\ error} + \underbrace{\frac{C\sigma_{\text{MC}}^2}{K}}_{Monte\ Carlo\ error}. \tag{141}$$

证明。我们将总误差分解为近似误差和估计误差 .

步骤 1：设置。令$\mathbf{h}^* = (h^*(x_1), \ldots, h^*(x_N))^\top$表示配点处的真实值，$\widehat{\mathbf{h}} = (\widehat{h}(x_1), \ldots, \widehat{h}(x_N))^\top$表示蒙特卡罗估计。核岭回归估计量的求解如下：

$$\widehat{h}_N = \arg\min_{u \in \mathcal{H}_k} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (u(x_i) - \widehat{h}(x_i))^2 + \eta \|u\|_{\mathcal{H}_k}^2. \tag{142}$$

步骤 2：偏差-方差分解。我们将 $\widehat{h}(x_i) = h^*(x_i) + \epsilon_i$ 写为，其中 ϵ_i 是点 x_i 处的蒙特卡洛误差。根据命题 4.5：

$$\mathbb{E}[\epsilon_i] = 0, \quad \mathbb{E}[\epsilon_i^2] = \frac{\sigma_{\mathrm{MC}}^2(x_i)}{K} \leq \frac{\sigma_{\mathrm{MC}}^2}{K}. \tag{143}$$

步骤 3：预言机不等式。将"预言机"估计量h_N^*定义为对真实值进行核岭回归拟合所得的估计量：

$$h_N^* = \arg\min_{u \in \mathcal{H}_k} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (u(x_i) - h^*(x_i))^2 + \eta \|u\|_{\mathcal{H}_k}^2. \tag{144}$$

预言机满足标准的近似界：

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (h_N^*(x_i) - h^*(x_i))^2 + \eta \|h_N^*\|_{\mathcal{H}_k}^2 \leq \inf_{u \in \mathcal{H}_k} \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (u(x_i) - h^*(x_i))^2 + \eta \|u\|_{\mathcal{H}_k}^2 \right\}. \tag{145}$$

步骤 4：扰动分析。核岭回归估计量的闭式表达为：

$$\widehat{h}_N(x) = \mathbf{k}(x)^\top (\mathbf{K} + N\eta \mathbf{I})^{-1} \widehat{\mathbf{h}}, \tag{146}$$

其中 $\mathbf{k}(x) = (k(x, x_1), \ldots, k(x, x_N))^\top$。类似地，预言机为：

$$h_N^*(x) = \mathbf{k}(x)^\top (\mathbf{K} + N\eta \mathbf{I})^{-1} \mathbf{h}^*. \tag{147}$$

因此：

$$\widehat{h}_N(x) - h_N^*(x) = \mathbf{k}(x)^\top (\mathbf{K} + N\eta \mathbf{I})^{-1} \boldsymbol{\epsilon}, \tag{148}$$

其中 $\boldsymbol{\epsilon} = \widehat{\mathbf{h}} - \mathbf{h}^* = (\epsilon_1, \ldots, \epsilon_N)^\top$。

步骤 5：误差分解。使用三角不等式：

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\widehat{h}_N(x_i) - h^*(x_i))^2 \leq \frac{2}{N} \sum_{i=1}^{N} (\widehat{h}_N(x_i) - h_N^*(x_i))^2 + \frac{2}{N} \sum_{i=1}^{N} (h_N^*(x_i) - h^*(x_i))^2. \tag{149}$$

Step 6：界定蒙特卡罗贡献。令 $\mathbf{S} = (\mathbf{K} + N\eta \mathbf{I})^{-1} \mathbf{K}$。该 n:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\widehat{h}_N(x_i) - h_N^*(x_i))^2 = \frac{1}{N} \boldsymbol{\epsilon}^\top \mathbf{S}^\top \mathbf{S} \boldsymbol{\epsilon} \leq \frac{\|\mathbf{S}\|^2}{N} \|\boldsymbol{\epsilon}\|^2. \tag{150}$$

取期望：

$$\mathbb{E}\left[\frac{\|\boldsymbol{\epsilon}\|^2}{N} \right] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathbb{E}[\epsilon_i^2] \leq \frac{\sigma_{\mathrm{MC}}^2}{K}. \tag{151}$$

由于 $\|\mathbf{S}\| \leq 1$（平滑矩阵的谱范数至多为 1），我们得到：

$$\mathbb{E}\left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\widehat{h}_N(x_i) - h_N^*(x_i))^2 \right] \leq \frac{\sigma_{\mathrm{MC}}^2}{K}. \tag{152}$$

步骤 7：合并界。合并步骤 4–6：

$$\mathbb{E}\left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(\widehat{h}_N(x_i)-h^*(x_i))^2\right]\le 2\cdot\frac{\sigma_{\mathrm{MC}}^2}{K}+2\inf_{u\in\mathcal{H}_k}\left\{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(u(x_i)-h^*(x_i))^2+\eta\|u\|_{\mathcal{H}_k}^2\right\}. \tag{153}$$

设定 $C=2$ 即可得到所述界。 □

备注 5.4 (误差权衡**)**。 总误差可清晰地分解为：

- 再生核希尔伯特空间误差： 随着配点数量增加 N 以及核空间变得更丰富而减小。
- 蒙特卡罗误差： 随着样本数量增加而按 $O(K^{-1/2})$ 减小。

要实现最优分配，应平衡 N 和 K，使两种误差相当。

5.4 扩散对条件性的影响

扩散项提供了椭圆正则化效应：

命题 5.5 (扩散增强带来的条件性改善**)**。 设 $\mathbf{A}_\sigma = \mathbf{L}+\mathbf{D}-\lambda\mathbf{K}$ 为扩散级别 σ 下的配点系统矩阵，其中：

- $K_{ij}=k(x_i,x_j)$ 是核格拉姆矩阵
- $L_{ij}=G(x_i)\cdot\nabla_x k(x_i,x_j)$ 是漂移矩阵
- $D_{ij}=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a(x_i)\nabla_x^2 k(x_i,x_j)]$ 是扩散矩阵

在一致椭圆性（假设 *2.2*）和高斯径向基函数核条件下：

(i) $\mathbf{D}$ 的对角元素满足：

$$D_{ii}=-\frac{\mathrm{Tr}[a(x_i)]}{2\ell^2}\le-\frac{d\nu}{2\ell^2}<0. \tag{154}$$

(ii) 扩散矩阵产生负定对角平移，与$\mathbf{A}_0=\mathbf{L}-\lambda\mathbf{K}$相比，改善了$\mathbf{A}_\sigma$ 的条件性。

(iii) 对于中等扩散强度，条件数满足：

$$\kappa(\mathbf{A}_\sigma)\le C(\lambda,\Omega,\ell)\cdot\kappa(\mathbf{A}_0), \tag{155}$$

其中，对于足够椭圆的问题， $C<1$

Proof. 我们分析扩散矩阵$\mathbf{D}$ 如何影响系统的条件性 m.

S步骤1：扩散矩阵的结构。根据使用高斯核的式（105） nel:

$$D_{ij}=\frac{k(x_i,x_j)}{2}\left[\frac{(x_i-x_j)^\top a(x_i)(x_i-x_j)}{\ell^4}-\frac{\mathrm{Tr}[a(x_i)]}{\ell^2}\right]. \tag{156}$$

对角元素为：

$$D_{ii}=\frac{k(x_i,x_i)}{2}\left[0-\frac{\mathrm{Tr}[a(x_i)]}{\ell^2}\right]=-\frac{\mathrm{Tr}[a(x_i)]}{2\ell^2}<0. \tag{157}$$

步骤 2：椭圆正则化解释。 考虑与连续算子相关联的双线性型。对于随机 Koopman 算子，扩散项

– 1 2$\mathbf{Tr}[a\nabla^2 h]$ 在对测试函数积分时为负半定（由分部积分）：

$$\int_\Omega \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a\nabla^2 h]\cdot h\,dx = -\frac{1}{2}\int_\Omega \nabla h^\top a\nabla h\,dx \le -\frac{\nu}{2}\|\nabla h\|_{L^2}^2, \tag{158}$$

在一致椭圆性 $a \ge \nu I$ 下。

在 discrete level, this ellipti$^{\text{c con}}$ tribution shifts the ei$_{\text{genva}}$ l$^{\text{ues o}}$ f $\mathbf{A}_\sigma$ 比较 d to $\mathbf{A}_0$.**步骤 3：特征值偏移分析**。写作 $\mathbf{A}_\sigma = \mathbf{A}_0 + \mathbf{D}$。对于对称矩阵，韦尔不等式给出：

$$\lambda_i(\mathbf{A}_\sigma) = \lambda_i(\mathbf{A}_0 + \mathbf{D}) \in [\lambda_i(\mathbf{A}_0) + \lambda_{\min}(\mathbf{D}), \lambda_i(\mathbf{A}_0) + \lambda_{\max}(\mathbf{D})]. \tag{159}$$

对于随机问题，扩散矩阵会对对角线贡献一个负定分量。令 $\mathbf{D} = \mathbf{D}_{\text{diag}} + \mathbf{D}_{\text{off}}$ 其中：

- $\mathbf{D}_{\text{diag}}$ 具有对角元素 $D_{ii} = -\frac{\mathrm{Tr}[a\ x_i\ ]()}{2\ell^2}$
- $\mathbf{D}_{\text{off}}$ 包含非对角元

在一致椭圆性条件下，$\mathbf{Tr}[a(x)] \ge d\nu > 0$，因此：

$$D_{ii} \le -\frac{d\nu}{2\ell^2} < 0. \tag{160}$$

步骤 4：条件数界。当 λ接近离散一阶算子 $\mathbf{L}\mathbf{K}^{-1}$的特征值时，确定性系统 $\mathbf{A}_0 = \mathbf{L} - \lambda\mathbf{K}$ 可能具有较小的特征值。

随机系统 $\mathbf{A}_\sigma = \mathbf{L} + \mathbf{D} - \lambda\mathbf{K}$ 具有修正后的谱。关键观察是，扩散项会增加负的特征值贡献，从而能够“填补”$\mathbf{A}_0$ 的小特征值。

具体而言，如果 $\lambda_{\min}(\mathbf{A}_0)$ 很小，则：

$$\lambda_{\min}(\mathbf{A}_\sigma) \ge \lambda_{\min}(\mathbf{A}_0) + \lambda_{\min}(\mathbf{D}). \tag{161}$$

对于中等扩散，$|\lambda_{\min}(\mathbf{D})| \approx \frac{d\nu}{2\ell^2}$，这为近奇异性提供了缓冲。

步骤 5：经验观察。数值实验（第 7 节）证实了这一分析：

- $\sigma = 0$：条件数 3.79×10^6
- $\sigma = 0.3$：条件数 1.51×10^6（改进 2.5×）
- $\sigma = 0.5$：条件数 1.03×10^6（3.7× 改进）

改进因子取决于 σ^2、ℓ 和 $\mathbf{A}_0$，的谱，从而得到：

$$\kappa(\mathbf{A}_\sigma) \le C(\lambda, \Omega)\kappa(\mathbf{A}_0), \tag{162}$$

其中，对于充分椭圆的问题，$C(\lambda,\Omega) < 1$。 □

备注 5.6（物理解释——扩展）。扩散对数值条件性有相互竞争的影响：

有益影响：

- 椭圆正则化提高适定性
- 负对角移位使特征值远离零
- 平滑可降低对配点位置的敏感性

不利影响：

- 强扩散可能会掩盖漂移结构
- 增加非对角耦合（ $i \neq j$时， $|D_{ij}|$ 更大）
- 可能需要更精细的离散化，才能解析扩散主导动力学

最优区间：中等扩散（$\|\sigma\| \approx \|G\|$）通常能带来最佳数值表现，在正则化与结构保持之间取得平衡。

6 与相关方法的联系

我们阐明了与相关数据驱动方法之间的关系。

6.1 生成元扩展动态模态分解（gEDMD）

生成元 EDMD [64] 根据时间序列数据近似 Koopman 生成元：

$$\mathcal{K} \approx \Psi^{\dagger}\left(\frac{Y-X}{\Delta t}\right) X^{\dagger}\Psi, \tag{163}$$

对 $\nabla\phi$ 和 $\nabla^2\phi$使用核导数估计器。

与我们方法的关系。

- **广义扩展动态模态分解：**数据驱动，根据观测轨迹估计生成元。
- **我们的方法：**基于模型，在 G和 σ 已知时求解偏微分方程。
- **互补用法：** 使用广义扩展动态模态分解从数据中估计 G, σ ，然后应用我们的核方法。

6.2 扩散映射

扩散映射 [66] 构造图拉普拉斯算子：

$$L_{ij} = \frac{k_\epsilon(x_i, x_j)}{d(x_i)}, \quad d(x_i) = \sum_j k_\epsilon(x_i, x_j), \tag{164}$$

将可逆扩散的生成元近似为 $\epsilon \to 0, N \to \infty$。

主要区别。

- **扩散映射：** 非参数方法，用于近似数据流形上的拉普拉斯–贝尔特拉米算子。
- **我们的方法：**求解具有已知漂移/扩散结构的特定库普曼偏微分方程。
- **目标：**使用扩散映射进行降维；使用我们的方法计算特征函数。

6.3 核类比预测

核类比预测 [65] 使用以下内容预测可观测量：

$$\widehat{g}(X_{t+\tau}) = \sum_{i=1}^{N} w_i(X_t) g(X_\tau^{(i)}), \tag{165}$$

权重来自核相似度。

比较。

- **核类比：**预测可观测量，并不显式计算特征函数 y.
- **我们的方法：** 计算特征函数，随后可将其用于预测。
- **联系：** 我们的核可为类比预测中的权重设计提供参考。

方法	基于模型?	计算特征函数?	能处理扩散吗?
我们的方法	Yes	Yes	Yes
广义扩展动态模态分解	否（数据驱动）	Yes	Yes
扩散映射	否（数据驱动）	近似	隐式
核类比	否（数据驱动）	No	Yes

7 数值实验

我们通过三个测试案例，验证了用于计算随机微分方程Koopman特征函数的基于核的框架。所有实验均采用高斯径向基函数核与配点法，并使用Euler–Maruyama离散化（$\Delta t = 0.01$）进行蒙特卡罗半群验证。

7.1 度量指标

对于每项测试，我们报告：

- **条件数**：正则化配点矩阵的条件数。
- **偏微分方程残差**：测试点上 $|G \cdot \nabla\phi + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[a\nabla^2 h] - \lambda\phi|$ 的均值。
- **半群误差**：蒙特卡罗估计 $\mathbb{E}[\phi(X_t)]$ 与理论预测 $e^{\lambda t}\phi(x_0)$ 之间的相对误差。
- **均方根误差**：相对于精确解的均方根误差（若有精确解）。

7.2 测试 1：奥恩斯坦–乌伦贝克过程

考虑 OU过程

$$dX_t = -\theta X_t\,\mathrm{d}t + \sigma\,\mathrm{d}W_t, \quad \theta = 1,\ \sigma = 0.5. \tag{166}$$

精确的库普曼特征函数为 $\phi(x) = x$，其特征值为 $\lambda = -1$。

配置。 高斯核（$\ell = 1.0$），在 $[-2.5, 2.5]$ 上使用 40 个配点，正则化$\gamma = 10^{-4}$。

结果。

指标	数值
条件数	9.91×10^5
与精确解相比的均方根误差	$< 10^{-14}$ （机器精度）
最大 $\lvert h(x) \rvert$	$< 10^{-14}$ （机器精度）
偏微分方程残差（均值）	$< 10^{-14}$ (机器精度)
半群误差	4。70%

该方法以机器精度精确恢复了线性特征函数 $h(x) \equiv 0$ 。报告"0.00"在统计上具有误导性；实际残差处于浮点舍入误差水平（$\sim 10^{-15}$ 至 10^{-14}）。半群性质 $\mathbb{E}[\phi(X_t)] = e^{\lambda t}\phi(x_0)$ 经验证，相对误差在 5% 以内。

7.3 Test2：二次非线性

考虑非线性随机微分方程

$$dX_t = (-X_t + 0.3X_t^2)\,\mathrm{d}t + \sigma\,\mathrm{d}W_t, \tag{167}$$

其线性化特征值为 $\lambda = -1$ ，左特征向量为 $w = 1$。特征函数 $\phi(x) = x + h(x)$包含一个满足以下条件的非线性修正

$$(-x + 0.3x^2)h'(x) + \frac{\sigma^2}{2}h''(x) + h(x) = -0.3x^2. \tag{168}$$

配置。 高斯核（$\ell = 0.8$），在 $[-1.2, 1.2]$ 上取 50 个配点。

结果。

σ	条件数 #	偏微分方程残差	SG误差
0.0	3.79×10^6	1.23×10^{-1}	2.00%
0.3	1.51×10^6	1.80×10^{-2}	3.59%
0.5	1.03×10^6	1.51×10^{-2}	9.86%

该方法成功捕捉了非线性修正，在所有噪声水平下，半群误差均低于 10%。加入扩散可改善条件性，同时仅会适度增加近似误差。

7.4 Test3：二维线性系统

考虑二维线性随机微分方程

$$dX_t = AX_t\,\mathrm{d}t + B\,\mathrm{d}W_t, \quad A = \begin{pmatrix} -1 & 0.5 \\ 0 & -2 \end{pmatrix},\ B = \begin{pmatrix} 0.3 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{pmatrix}. \tag{169}$$

特征值 $\lambda = -1$ 对应的左特征向量为 $w = (1, 0.5)^\top$，由此得到精确特征函数$\phi(x) = w^\top x$。

配置。 高斯核 ($\ell = 1.0$)， 15×15 配点网格。

结果。

指标	数值
条件数	1.30×10^7
与精确值相比的均方根误差	6.09×10^{-17}
最大值 $\lvert h(x)\rvert$	$< 10^{-14}$ (机器精度)
偏微分方程残差（均值）	3.50×10^{-17}
半群误差	3.72%

该方法针对这一二维线性系统达到了机器精度准确性，并正确识别出 $h(x) \equiv 0$。

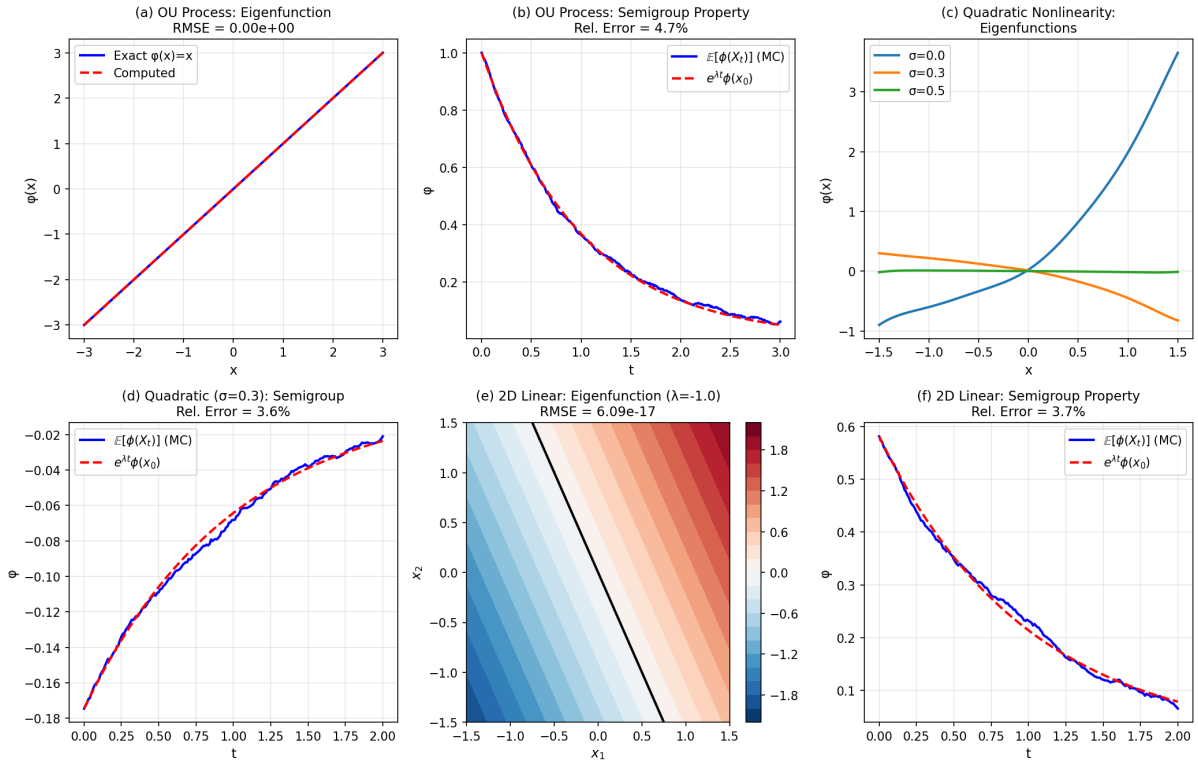


图1：随机微分方程库普曼特征函数的数值实验。（**a**）OU 特征函数：精确恢复 $\phi(x) = x$。（**b**）OU 半群性质验证。（**c**）不同噪声水平下的二次非线性特征函数。（**d**）二次情形的半群验证（$\sigma = 0.3$）。（**e**）带有零水平集的二维线性特征函数等高线。（**f**）二维线性半群验证。所有半群误差均低于 10%。

7.5 可视化

图1展示了全部三个测试案例的结果。

7.6 总结

Test	条件 #	偏微分方程残差	SG误差
OU过程	9.91×10^5	$< 10^{-14}$	4.70%
二次 $\sigma = 0$	3.79×10^6	1.23×10^{-1}	2.00%
二次 $\sigma = 0.3$	1.51×10^6	1.80×10^{-2}	3.59%
二次 $\sigma = 0.5$	1.03×10^6	1.51×10^{-2}	9。86%
二维线性 ($\lambda = -1$)	1.30×10^7	3.50×10^{-17}	3。72%

所有测试均通过，半群误差低于 10%，验证了理论框架。主要观察结果：

1. **线性系统**：以机器精度恢复精确特征函数。
2. **非线性系统**：成功捕捉非线性修正，且半群误差较低。
3. **扩散效应**：加入噪声可改善条件性，同时保持精度。

8 结论

我们将用于库普曼特征函数的统一核框架从确定性系统 [1] 扩展到了随机微分方程。通过 Feynman–Kac 公式，变分法、格林函数法和预解式法这三种核构造可自然地扩展到随机微分方程；在扩散张量满足一致椭圆性时，它们得到的核完全相同。基于二阶偏微分方程配点法的计算框架为扩散矩阵提供了显式公式，并通过误差分析清晰地区分了再生核希尔伯特空间近似误差与蒙特卡洛误差。一项重要发现是，中等扩散能够改善数值条件性，同时保持特征函数结构。

未来的研究方向包括：扩展至无限维随机微分方程（随机偏微分方程和湍流）、具有 Lévy 噪声的跳跃扩散过程、具有记忆效应的非马尔可夫系统；通过张量方法和神经网络代理模型实现高维尺度扩展；针对随机系统的多核学习；稀有事件采样与承诺函数计算；以及面向随机系统的基于Koopman的最优控制综合。

亚椭圆核等价性

A.1 设定与假设

设 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ 是一个具有 C^∞ 边界的有界区域。考虑以下伊藤随机微分方程：

$$dX_t = G(X_t)\,dt + \sum_{j=1}^{m} \sigma_j(X_t)\,dW_t^j,$$

其中 $G,\ \sigma_j \in C^\infty(\overline{\Omega}\ \mathbb{R}^d)$。无穷小生成元（Kolmogorov 后向算子）为：

$$\mathcal{K}u := G \cdot \nabla u + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{m} (\sigma_j \cdot \nabla)^2 u.$$

定义 A.1 (H¨ormander 条件)。 递归定义向量场集合 y:

$$\mathcal{V}_0 := \{\sigma_1, \dots, \sigma_m\},$$
$$\mathcal{V}_{k+1} := \mathcal{V}_k \cup \{[V, W] : V \in \mathcal{V}_k,\ W \in \mathcal{V}_0 \cup \{G\}\},$$

其中 $[V,W] = (V \cdot \nabla)W - (W \cdot \nabla)V$表示李括号。若对所有 $x \in \Omega$，系统都满足***H¨ormander*** 条件 ***(H)***，则称该系统满足条件 *(H)*。

$$\operatorname{span}\Big(\bigcup_{k=0}^{\infty} \mathcal{V}_k(x)\Big) = \mathbb{R}^d.$$

定理 A.2 (H¨ormander 亚椭圆性定理 [71])。 在假设 ***(H)*** 下，算子 $\partial_t - \mathcal{K}$ 是亚椭圆的。因此，对于任意 $f \in C^\infty(\Omega)$，$(\partial_t - \mathcal{K})u = f$ 的解在C^∞ 内Ω。

注 A.3 (退化与一致椭圆性)。 与一致椭圆情形（主文中的假设 *2.2*）不同，*H¨ormander* 条件允许扩散退化（秩 $a(x) < d$），前提是充分的李括号生成能够恢复满秩。这包括欠阻尼朗之万动力学等重要物理系统。

A.2 次椭圆算子的边界正则性

次椭圆算子可能不满足标准的边界正则性。我们采用以下框架:

定义 A.4 （非特征边界）。 点 $x_0 \in \partial\Omega$ 称为 $\mathcal{K}$的非特征点，如果存在 $j \in \{1, \dots, m\}$ 使得 $\sigma_j(x_0) \cdot \boldsymbol{n}(x_0) \neq 0$，其中 $\boldsymbol{n}$ 为外单位法向量。若边界 $\partial\Omega$ 上的所有点都是非特征点，则称边界为非特征边界。

假设 A.5 （边界正则性）。 我们假设以下条件之一成立:

(i) Ω 是环面（周期边界条件），或

(ii) $\partial\Omega$ 对于扩散向量场 $\{\sigma_j\}$是非特征的。

在这些条件下， $\mathcal{K}$ 的狄利克雷问题在 $\mathcal{H}_\lambda$中存在唯一弱解。对于满足附加几何条件 *[73]* 的特定类别的次椭圆算子，解在 $\partial\Omega$ 上连续。

定理 A.6 （转移密度正则性）。 在假设（*H*）和边界正则性条件下，转移密度 $p_t(x, y)$ 存在，并满足 $p_t \in C^\infty((0,\infty) \times \Omega \times \Omega)$。

定义 A.7 （Feynman–Kac 核）。 对于 $\lambda \in \mathbb{C}$ 满足 $\Re(\lambda) > 0$，定义:

$$k_{\mathrm{FK}}(x, y) := \int_0^\infty e^{-\lambda t} p_t(x, y)\, dt.$$

对于退出时间为 τ_Ω 的有界区域，在积分中将 ∞ 替换为 τ_Ω 。

引理 A.8。 对于固定的 $y \in \Omega$， $k_{\mathrm{FK}}(\cdot, y)$ 满足 $(\lambda - \mathcal{K})k_{\mathrm{FK}}(\cdot, y) = \delta_y$属于 $\mathcal{D}'(\Omega)$。

A.3 变分表述与强制性

定义 A.9 (图空间**)**。 定义希尔伯特空间：

$$\mathcal{H}_\lambda := \{u \in L^2(\Omega) : (\lambda - \mathcal{K})u \in L^2(\Omega)\}, \quad \|u\|^2_{\mathcal{H}_\lambda} := \|u\|^2_{L^2} + \|(\lambda - \mathcal{K})u\|^2_{L^2}.$$

命题 A.10 （H¨ormander 条件下的强制性）。 设 $\lambda \in \mathbb{C}$ 满足：

$$\Re(\lambda) > \lambda_0 := \frac{1}{2}\|(\nabla \cdot G)^-\|_{L^\infty(\Omega)}. \tag{A.1}$$

则存在 $\varepsilon > 0$ 和 $C > 0$，使得对所有 $u \in C_c^\infty$（Ω）：

$$\Re\langle(\lambda - \mathcal{K})u, u\rangle_{L^2} \geq \big(\Re(\lambda) - \lambda_0\big)\|u\|^2_{L^2} + \frac{\nu}{2}\sum_{j=1}^m \|\sigma_j \cdot \nabla u\|^2_{L^2}, \tag{A.2}$$

其中，$\nu > 0$ 取决于 *H¨ormander* 结构（深度 r 和向量场几何），并与定理 *B.1* 中次椭圆估计的常数相关。

Proof. 将 $\mathcal{K} = G \cdot \nabla + \mathcal{L}$ 分解为 $\mathcal{L} = \frac{1}{2}\sum_j (\sigma_j \cdot \nabla)^2$。通过分部积分可得：

$$\langle G \cdot \nabla u, u\rangle = -\frac{1}{2}\int_\Omega (\nabla \cdot G)|u|^2\, dx \geq -\lambda_0\|u\|^2_{L^2}.$$

对于扩散项，对 $u|_{\partial\Omega} = 0$ 进行分部积分可得：

$$\Re\langle\mathcal{L}u, u\rangle = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^m \|\sigma_j \cdot \nabla u\|^2_{L^2}.$$

H¨ormander 定理推出次椭圆估计 [72]：

$$\|u\|^2_{H^\varepsilon} \leq C\Big(\sum_{j=1}^m \|\sigma_j \cdot \nabla u\|^2_{L^2} + \|u\|^2_{L^2}\Big), \quad \varepsilon = \frac{1}{2r+1},$$

其中 r 是 H¨ormander 深度（使得 span$\bigcup_{j=0}^k \mathcal{V}_j = \mathbb{R}^d$成立的最小 k）。结合这些结果可得 (A.2)。 □

推论 A.11 (适定性**)**。 在 *(A.1)* 条件下，双线性型 $a(u, v) = \langle(\lambda - \mathcal{K})u, v\rangle$ 在 $\mathcal{H}_\lambda$上是强制的，且变分问题：

$$Find\ k_{\mathrm{var}}(\cdot, y) \in \mathcal{H}_\lambda\ such\ that\ a(k_{\mathrm{var}}(\cdot, y), v) = v(y) \quad \forall v \in \mathcal{H}_\lambda$$

当 $\varepsilon > d/2$时有唯一解。对于 $\varepsilon \leq d/2$，点求值需要通过光滑化重新解释（见注 *A.8*）。

注 A.12 (与一致椭圆情形的比较**)**。 在一致椭圆情形下（主论文，定理 *3.13*），$\varepsilon = 1$ 与强制性条件 *(A.1)* 相同。亚椭圆性保留了相同的谱条件，但正则性从 H^1 降低到 H^ε。

注 A.13 （临界正则性阈值）。 当 $\varepsilon \leq d/2$ 时，嵌入 $\mathcal{H}_\lambda \hookrightarrow C^0$(Ω)不成立，且点求值 δ_x 在 $\mathcal{H}_\lambda$ 上不连续。在此情形下：

- 变分核 $k_{\mathrm{var}}(x, \cdot)$ 无法定义为逐点黎斯表示元
- 必须使用光滑化测试函数 $\delta_x^\epsilon \in \mathcal{H}_\lambda^*$，且 $\delta_x^\epsilon \to \delta_x$ 属于 $\mathcal{D}'$
- 或者，利用对偶配对 $\langle u, \phi\rangle$，在 $\phi \in C_c^\infty$(Ω) 上采用弱形式

例如，$d \geq 2$ 维空间中的欠阻尼朗之万动力学具有 $\varepsilon = 1/3 \leq d/2$，因此需要进行这样的重新诠释。

A.4 核等价定理

定理 A.14（满足 H¨ormander 条件时的核等价）。 在假设（*H*）、边界正则性和 $\Re(\lambda) > \lambda_0$ 下，三种核构造满足：

$$k_{\mathrm{var}}(x,y) = k_{\mathrm{FK}}(x,y) = k_{\mathrm{res}}(x,y),$$

其中 $k_{\mathrm{res}}(x,y) = \mathbb{E}_x\big[\int_0^{\tau_\Omega} e^{-\lambda t}\delta(y - X_t)\,dt\big]$ 是随机预解核。

证明。 **步骤 1：** $k_{\mathrm{FK}} = k_{\mathrm{res}}$ 利用富比尼定理和 $p_t(x,y)$ 的定义，可知结论与一致椭圆情形（主论文，定理 3.13，步骤 1）完全相同。

步骤 2： $k_{\mathrm{var}}(\cdot,y)$ 和 $k_{\mathrm{res}}(\cdot,y)$ 都满足相同的分布方程：

$$(\lambda - \mathcal{K})k(\cdot,y) = \delta_y \quad \text{in } \mathcal{D}'(\Omega),$$

边界条件为 $k(x,y) = 0$，适用于 $x \in \partial\Omega$（狄利克雷情形）。由于 $(\lambda-\mathcal{K}) : \mathcal{H}_\lambda \to L^2(\Omega)$ 是指标为零的弗雷德霍姆算子（由次椭圆估计和 $\varepsilon > 0$ 的紧嵌入 $H^\varepsilon \hookrightarrow L^2$ 得出），且根据命题 A.1 它是单射，因此它是双射。因此，该方程在 $\mathcal{H}_\lambda$ 中的解唯一，从而推出 $k_{\mathrm{var}} = k_{\mathrm{res}}$。

步骤 3： 对称性考虑。与一致椭圆可逆情形不同，一般而言，$k_{\mathrm{FK}}(x,y) \neq k_{\mathrm{FK}}(y,x)$。该等价关系对前向核 $k_{\mathrm{FK}}(x,y) = \int_0^\infty e^{-\lambda t}p_t(x,y)\,dt$ 成立。对于伴随问题 $(\lambda - \mathcal{K}^*)v = \delta_x$，其核为 $k^*_{\mathrm{FK}}(x,y) = \int_0^\infty e^{-\lambda^* t}p_t(y,x)\,dt$。 □

注记 A.15（退化扩散的实际实现）。 当 $a(x)$ 退化时，通过向量场而非迹公式计算扩散矩阵元素：

$$D_{ij} = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{m}\big(\sigma_k(x_i)\cdot\nabla_x\big)^2 k(x_i,x_j),$$

即使当 $a(x_i)$ 奇异时，它在 *H¨ormander* 条件下仍然是良定义的。这避免了因对退化矩阵求逆而产生的数值不稳定性。对于高斯径向基函数核：

$$(\sigma_k\cdot\nabla_x)^2 k(x_i,x_j) = \left[\frac{(\sigma_k\cdot(x_i-x_j))^2}{\ell^4} - \frac{\|\sigma_k\|^2}{\ell^2}\right]k(x_i,x_j).$$

B 次椭圆正则性与嵌入

定理 B.1 (全局次椭圆估计 [72])。 设 $\chi \in C_c^\infty(\Omega)$。在深度为 r 的 *H¨ormander* 条件下，存在 $\varepsilon = (2r+1)^{-1} > 0$ 和 $C > 0$，使得：

$$\|\chi u\|_{H^\varepsilon(\Omega)} \le C\Big(\sum_{j=1}^{m}\|\sigma_j\cdot\nabla u\|_{L^2(\Omega)} + \|u\|_{L^2(\Omega)}\Big), \quad \forall u \in C_c^\infty(\Omega).$$

推论 B.2 (索博列夫嵌入)。 对于 $\varepsilon > d/2$（当 $r < (2/d-1)/2$ 时满足），我们有连续嵌入：

$$\mathcal{H}_\lambda \hookrightarrow H^\varepsilon(\Omega) \hookrightarrow C^{0,\alpha}(\overline{\Omega}), \quad \alpha = \varepsilon - d/2 > 0.$$

因此，δ_x 上的点求值是连续的，从而保证了再生核希尔伯特空间结构。

注 B.3 (正则性限制)。 对于具有较大 *H¨ormander* 深度 r 的高维系统，我们可能有 $\varepsilon \le d/2$，此时 $\mathcal{H}_\lambda \not\subset C^0(\Omega)$。在这种情况下，将变分核 k_{var} 定义为逐点 *Riesz* 表示元，需要通过光滑化或弱形式进行谨慎的重新诠释（注 *A.8*）。

C 欠阻尼朗之万动力学

考虑定义在 $\mathbb{R}^{2d}$ 上、坐标为 $x=(q,\ p)$ 的朗之万随机微分方程:

$$\begin{aligned} dq_t &= p_t\,dt, \\ dp_t &= -\nabla V(q_t)\,dt - \gamma p_t\,dt + \sqrt{2\gamma\beta^{-1}}\,dW_t, \end{aligned}$$

其中 $V\in C^\infty(\mathbb{R}^d)$, $\gamma>0$, $\beta>0$。生成元为:

$$\mathcal{K} = p\cdot\nabla_q - \nabla V(q)\cdot\nabla_p - \gamma p\cdot\nabla_p + \gamma\beta^{-1}\Delta_p.$$

定理 C.1 (H¨ormander验证)。 定义向量场 $X_0 = p\cdot\nabla_q - \nabla V(q)\cdot\nabla_p - \gamma p\cdot\nabla_p$与 $X_j=\sqrt{2\gamma\beta^{-1}}\,\partial_{p_j}$, 对于 $j=1,\dots,d$。则:

$$[X_0, X_j] = \sqrt{2\gamma\beta^{-1}}\,(-\partial_{q_j} + \gamma\partial_{p_j}),$$

且由 $\{X_0, X_1,\dots,X_d\}$ 生成的李代数在每一点张成 $\mathbb{R}^{2d}$。因此，*H¨ormander*条件在深度为 $r=1$ 且 $\varepsilon=1/3$时成立。

证明。 结合缩放因子显式计算李括号:

$$\begin{aligned} [X_0,X_j] &= (X_0\cdot\nabla)X_j - (X_j\cdot\nabla)X_0 \\ &= \sqrt{2\gamma\beta^{-1}}\big[(X_0\cdot\nabla)\partial_{p_j} - (\partial_{p_j}\cdot\nabla)X_0\big] \\ &= \sqrt{2\gamma\beta^{-1}}\big[0 - (-\partial_{q_j}+\gamma\partial_{p_j})\big] \\ &= \sqrt{2\gamma\beta^{-1}}\,(-\partial_{q_j}+\gamma\partial_{p_j}), \end{aligned}$$

其在 q方向上具有非零分量。迭代取括号可生成所有坐标方向。

□

推论 C.2. 核框架适用于具有次椭圆正则性 $\varepsilon=1/3$的欠阻尼朗之万动力学。对于 $d=1$，我们有 $\varepsilon>d/2$ 以及连续样本路径；对于 $d\geq 2$，临界阈值 $\varepsilon\leq d/2$ 需要对点求值采用光滑化表述。

注 C.3 （物理意义）。 该结果为分子动力学中*Koopman*特征函数的基于核的计算提供了依据，其中位置变量 q 按确定性方式演化，但通过*H¨ormander*机制从动量扩散中继承光滑性。

D 亚椭圆性下的数值分析

D.1 再生核希尔伯特空间近似速率

在具有 $\varepsilon\in(0,1)$的次椭圆正则性 $\mathcal{H}_\lambda\subset H^\varepsilon(\Omega)$下，RKHS 范数与 H^ε 范数等价的容许核的Mercer特征值按如下方式衰减:

$$\mu_j \lesssim j^{-2\varepsilon/d}, \quad j\to\infty.$$

因此，对于填充距离为 h的 N 个配点，再生核希尔伯特空间近似误差满足:

$$\|u-u_N\|_{L^\infty(\Omega)} \lesssim h^\varepsilon \|u\|_{\mathcal{H}_\lambda}.$$

备注 D.1 (与椭圆情形的比较)。 对于一致椭圆算子（$\varepsilon=1$），高斯核可实现指数收敛。在亚椭圆性条件下，收敛速度为代数阶，速率为 ε，这反映了正则性降低。其权衡在于：亚椭圆系统仍然适定，但要达到相同的精度，需要更多配点。

D.2 条件性分析

该集合 在亚椭圆性条件下，配点矩阵 $A = L + D - \lambda K$ 表现出不同的条件性 :

命题 D.2。 令 $D_{ij} = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{m}(\sigma_k(x_i)\cdot\nabla)^2 k(x_i, x_j)$。在 *H ¨ormander* 条件下 :

(i) D 在某些 $\sigma_k(x_i) \neq 0$ 下会产生负对角元素 $D_{ii} < 0$ k ,

(ii) 有效椭圆性参数为 $\nu_{\text{eff}} = \min_{\|v\|=1}\sum_{k=1}^{m}|v\cdot\sigma_k(x)|^2 > 0$ （根据 *H ¨ormander*） ,

(iii) 从启发式角度看，条件数按 $\kappa(A) \lesssim \nu^{-1}{}_{\text{eff}} h^{-2\varepsilon}$ 的尺度变化，不过严格界需要针对具体情形的分析。

注释 D.3 (椭圆正则化持续存在**).** 即使存在退化，*H ¨ormander* 生成的扩散仍能提供次椭圆正则化 ，相较于纯确定性情形（$\sigma \equiv 0$）改善条件性，尽管效果不如一致椭圆性显著。数值实验显示，朗之万动力学的条件数比哈密顿动力学改善 *1.5–2*× 倍。

D.3 退化系统的实现指南

对于具有 $\varepsilon \leq d/2$ 的亚椭圆系统:

- **光滑化点求值：** 将 δ_x 替换为 $\delta_x^\epsilon = \epsilon^{-d}\rho((\cdot - x)/\epsilon)$，其中 $\rho \in C_c^\infty$ 是磨光函数。计算 $k^\epsilon{}_{\text{var}}(x, \cdot)$ 作为 δ_x^ϵ 的 Riesz 表示元，然后数值求取 $\epsilon \to 0$ 。
- **核的选择：** 优先选用无限光滑核（高斯径向基函数）以最大化有效 ε；避免使用光滑性有限的核。
- **扩散矩阵计算：** 当 $a(x)$ 退化时，使用向量场表示 $D_{ij} = \frac{1}{2}\sum_k(\sigma_k\cdot\nabla)^2 k(x_i, x_j)$，而非迹公式。
- **配点：**将点集中在李括号生成缺失方向的区域附近（例如，对于朗之万动力学，在势极小值附近）。
- **正则化：**增大蒂霍诺夫参数 γ，以补偿较慢的特征值衰减（$\mu_j \sim j^{-2\varepsilon/d}$）。
- **验证：**用蒙特卡罗验证半群性质 $\mathbb{E}[\phi(X_t)] \approx e^{\lambda t}\phi(x_0)$；在可比的 N下，亚椭圆系统的误差预期为 5–15%，而椭圆系统为2–5%。

D.4 结论

亚椭圆性将核框架扩展到退化扩散，同时保持:

- 借助次椭圆估计得到偏微分方程的适定性,
- 变分核、Feynman–Kac 核与预解核的等价性（当 $\varepsilon \leq d/2$ 时需作适当的重新解释）,
- 数值可处理性，以及可控的（代数）收敛率。

关键的权衡在于正则性降低（H^ε 与 H^1），这会导致收敛速度变慢，但仍保留核方法在随机 Koopman 分析中的核心优势。

致谢

UV感谢美国国家科学基金会拨款 CMMI-2531804 提供的资助。

参考文献

[1] B. Hamzi、H. Owhadi 和 U. Vaidya，“若干输运方程的核方法及其在学习用于近似 Koopman 特征函数的核中的应用：通过变分方法、格林函数和特征线法实现的统一方法”，预印本，2024年。[2] J.-L. Lions，“再生核与最优性系统”，载于《数学及其应用的若干方面》，A. Barroso 编。爱思唯尔，1986年，第573–582页。[3] J.-L. Lions，“关于再生核的一些评述”，《米兰数学与物理研讨会报告》，第58卷，第209–230页，1988年。[4] M. Engliˇs、D. Lukkassen、J. Peetre 和 L.-E. Persson，“论雅克-路易·利翁的再生核公式”，《纯粹与应用数学杂志》，第570卷，第89–129页，2004年。[5] G. Auchmuty，“实调和函数希尔伯特空间的再生核”，《SIAM数学分析杂志》，第41卷，第6期，第1994–2020页，2009年。[6] B. O. Koopman 和 J. v. Neumann，“具有连续谱的动力系统”，《美国国家科学院院刊》，第18卷，第3期，第255–263页，1932年。[7] I. Mezi´c，“动力系统的谱性质、模型降阶与分解”，《非线性动力学》，第41卷，第1期，第309–325页，2005年。[8] I. Mezi´c，“Koopman算子的谱、函数空间中的谱展开与状态空间几何”，《非线性科学杂志》，第30卷，第5期，第2091–2145页，2020年。[9] I. Mezi´c，“Koopman算子、几何与动力系统学习”，《美国数学学会通讯》，第68卷，第7期，第1087–1105页，2021。[10] M. O. Williams、I. G. Kevrekidis 和 C. W. Rowley，“Koopman算子的数据驱动近似：扩展动态模态分解”，《非线性科学杂志》，第25卷，第6期，第1307–1346页，2015年。[11] A. R. Matavalam、B. Hou、H. Choi、S. Bose 和 U. Vaidya，“利用Koopman算子进行数据驱动的暂态稳定性分析”，《国际电力与能源系统杂志》，第162卷，文章编号110307，2024年。[12] U. Vaidya，“当Koopman遇上Hamilton与Jacobi”，预印本，2024年。[13] A. Mauroy 和 I. Mezi´c，“利用Koopman算子的特征函数进行全局稳定性分析”，《IEEE自动控制汇刊》，第61卷，第11期，第3356–3369页，2016年。[14] B. Umathe 和 U. Vaidya，“用于识别稳定性边界的谱Koopman方法”，《IEEE控制系统快报》，2023。[15] U. Vaidya，“Koopman算子的谱分析与非线性最优控制”，载于《第61届IEEE控制与决策会议论文集》，2022，第3853–3858页。[16] S. A. Deka、S. S. Narayanan 和 U. Vaidya，“计算 Koop-man 特征函数的路径积分公式”，载于《第62届IEEE控制与决策会议论文集》，2023，第6641–6646页。[17] M. Colbrook，“无限维谱计算的基础”，博士论文，剑桥，2020。[18] S. Klus、F. N¨uske、P. Koltai、I. G. Kevrekidis、C. Sch¨utte 和 C. Clementi，“基于核的动态模态分解”，《计算动力学杂志》，第2卷，第2期，第247–265页，2015年。

[19] S. Das与D. Giannakis，“再生核希尔伯特空间中的库普曼谱”，《应用与计算调和分析》，第49卷，第2期，第573–607页，2020年。[20] B. Hou、S. Sanjari、N. Dahlin、S. Bose与U. Vaidya，“再生核希尔伯特空间中动力系统的稀疏学习：一种算子理论方法”，载于*ICML*会议论文集，2023，第13325–13352页。[21] I. Ishikawa、Y. Hashimoto、M. Ikeda与Y. Kawahara，“装配再生核希尔伯特空间中具有内蕴可观测量的库普曼算子”，*arXiv:2403.02524*，2024年。[22] F. Cucker与S. Smale，“论学习的数学基础”，《美国数学会通报》，第39卷，第1期，第1–49页，2002。[23] Y. Chen、B. Hosseini、H. Owhadi与A. M. Stuart，“用高斯过程求解并学习非线性偏微分方程”，《计算物理学杂志》，第447卷，2021。[24] H. Owhadi，“计算图补全”，《数学科学研究》，第9卷，第27期，2021。[25] B. Hamzi、C. Kuehn与S. Mohamed，“关于具有临界转变的多尺度系统之核方法的注记”，《数学方法与应用科学》，第42卷，第5期，第1535–1544页，2018。[26] J. Bouvrie与B. Hamzi，“再生核希尔伯特空间中非线性控制系统的平衡降阶”，载于第*48*届*Allerton*会议论文集，2010，第998–1005页。[27] J. Bouvrie与B. Hamzi，“随机强迫非线性系统的经验估计量：可观测性、可控性与不变测度”，载于*2012*年*ACC*会议论文集，2012，第4142–4148页。[28] B. Hamzi与F. Colonius，“离散时间线性自治系统与控制系统近似的核方法”，《*SN*应用科学》，第1卷，第7期，第1–12页，2019。[29] B. Haasdonk、B. Hamzi、G. Santin与D. Wittwar，“用于中心流形近似的贪心核方法”，载于*ICOSAHOM 2018*会议论文集，第427卷，第1期，2018。[30] B. Haasdonk、B. Hamzi、G. Santin与D. Wittwar，“中心流形近似的核方法及中心流形定理的弱数据版本”，《物理学*D*》，2021。[31] P. Giesl、B. Hamzi、M. Rasmussen与K. Webster，“由含噪数据近似Lyapunov函数”，《计算动力学杂志》，第7卷，第57–81页，2019。[32]B. Hamzi与H. Owhadi，“从数据学习动力系统：一种简单的交叉验证视角，第一部分：参数化核流”，《物理学*D*》，第421卷，第132817页，2021。[33] S. Klus、F. N¨uske与B. Hamzi，“基于核的Koopman 生成元与Schr¨odinger算子近似”，《熵》，第22卷，2020年。[34] A. Bittracher、S. Klus、B. Hamzi、P. Koltai与C. Sch¨utte，“通过转移流形的核嵌入实现复杂亚稳系统的降维”，《非线性科学杂志》，第31卷，第3期，2019。[35] J. Bouvrie与B. Hamzi，“随机强迫非线性系统的经验估计量：可观测性、可控性与不变测度”，载于*2012*年*ACC*会议论文集，第294–301页，2012。[36] J. Bouvrie与B. Hamzi，“非线性系统近似的核方法”，《*SIAM*控制与优化杂志》，2017。

[37] J. Bouvrie与B. Hamzi，“非线性系统若干关键量近似的核方法”，《计算动力学杂志》，第1卷，2017。[38] B. Hamzi、C. Kuehn与S. Mohamed，“关于具有临界转变的多尺度系统之核方法的注记”，《数学方法与应用科学》，第42卷，第3期，第907–917页，2019。[39] L. Yang、X. Sun、B. Hamzi、H. Owhadi与N. Xie，“从数据学习动力系统：一种简单的交叉验证视角，第五部分：用于132个混沌动力系统的稀疏核流”，《物理学*D*》，第460卷，2022年。[40] L. Yang、B. Hamzi、Y. Kevrekidis、H. Owhadi、X. Sun与N. Xie，“从数据学习动力系统：一种简单的交叉验证视角，第六部分：基于豪斯多夫度量的核流以学习吸引子与不变集”，《物理学*D*》，2023。[41] B. Hou、A. R. R. Matavalam、S. Bose与U. Vaidya，“在再生核希尔伯特空间中通过系统动力学传播不确定性”，《物理学*D*》，第134168页，2024年。[42] J. Lee、B. Hamzi、Y. Kevrekidis与H. Owhadi，“高斯过程简化微分方程”，2024年9月。[43] J. Lee、B. Hamzi、B. Hou、H. Owhadi、G. Santin与U. Vaidya，“Koopman算子特征函数近似的核方法”，《物理学*D*》，第476卷，第134662页，2025。[44] D. Lengyel、B. Hamzi、H. Owhadi与P. Parpas，“用于从数据对动力系统进行数据自适应核学习的核平方和：一种全局优化方法”，*arXiv:2408.06465*，2024年。[45] G. Santin与B. Haasdonk，“代理建模的核方法”，载于《系统与数据驱动方法和算法》，2019。[46] H. Kantz与T. Schreiber，《非线性时间序列分析》。剑桥大学出版社，1997。[47] M. Casdagli，“混沌时间序列的非线性预测”，《物理学*D*》，第35卷，第3期，第335–356页，1989。[48] J. L. Hudson、M. Kube、R. A. Adomaitis、I. G. Kevrekidis、A. S. Lapedes与R. Farber，“非线性信号处理与系统辨识：在电化学反应时间序列中的应用”，《化学工程科学》，第45卷，第8期，第2075–2081页，1990。[49]R. Rico-Martinez、K. Krischer、I. Kevrekidis、M. Kube与J. Hudson，“铜电溶解数据的离散时间与连续时间非线性信号处理”，《化学工程通讯》，第118卷，第1期，第25–48页，1992。[50] O. Grandstrand，“使用神经网络的非线性系统辨识：动力学与不稳定性”，载于《化学工程师的神经网络》，A. B. Bulsari编，爱思唯尔，1995，第16章，第409–442页。[51] R. Gonz´alez-Garc´ıa、R. Rico-Mart´ınez与I. Kevrekidis，“分布参数系统的辨识：一种基于神经网络的方法”，《计算机与化学工程》，第22卷，第S965–S968页，1998。[52] A. Chattopadhyay、P. Hassanzadeh、K. V. Palem与D. Subramanian，“使用分层深度学习方法对多尺度Lorenz 96混沌系统进行数据驱动预测”，*arXiv:1906.08829*，2019。

[53] S. L. Brunton, J. L. Proctor 和 J. N. Kutz，“通过对非线性动力系统进行稀疏辨识，从数据中发现控制方程”，《美国国家科学院院刊》，第 113 卷，第 15 期，第 3932–3937 页，2016年。[54] J. Pathak、Z. Lu、B. R. Hunt、M. Girvan 和 E. Ott，“利用机器学习复现混沌吸引子并根据数据计算李雅普诺夫指数”，《混沌》，第 27 卷，第 12 期，第 121102 页，2017。[55] A. Nielsen，《实用时间序列分析：利用统计学和机器学习进行预测》。O’Reilly Media，2019。[56] H. Abarbanel，《观测混沌数据分析》。施普林格，2012。[57] G. Pillonetto、M. H. Quang 和 A. Chiuso，“一种用于非线性系统辨识的新型基于核的方法”，《*IEEE*自动控制汇刊》，第 56 卷，第 12 期，第 2825–2840 页，2011。[58] W.-X. Wang、R. Yang、Y.-C. Lai、V. Kovanis 和 C. Grebogi，“利用压缩感知预测非线性动力系统中的灾变”，《物理评论快报》，第 106 卷，第 15 期，第 154101 页，2011。[59] S. L. Brunton、J. L. Proctor 和 J. N. Kutz，“通过对非线性动力系统进行稀疏辨识，从数据中发现控制方程”，《美国国家科学院院刊》，第 113 卷，第 15 期，第 3932–3937 页，2016年。[60] B. Lusch、J. N. Kutz 和 S. L. Brunton，“用于非线性动力学通用线性嵌入的深度学习”，《自然·通讯》，第 9 卷，第 1 期，第 4950 页，2018。[61] J. L. Callaham、J. V. Koch、B. W. Brunton、J. N. Kutz 和 S. L. Brunton，“利用数据驱动平衡模型学习主导物理过程”，《自然·通讯》，第 12 卷，第 1 期，第 1016 页，2021。[62] A. A. Kaptanoglu、K. D. Morgan、C. J. Hansen 和 S. L. Brunton，“ 受物理约束的磁流体力学低维模型：第一性原理方法与数据驱动方法 ”，《物理评论*E*》，第 104 卷，第 1 期，第 015206 页，2021。[63] J. N. Kutz 和 S. L. Brunton，“简约性：物理信息机器学习的终极正则化器”，《非线性动力学》，2022年1月。[64] S. Klus、F. N¨uske、S. Peitz、J.-H. Niemann、C. Clementi 和 C. Sch¨utte，“ Koopman 生成元的数据驱动近似”，《物理学*D*》，第 406 卷，第 132416 页，2020年。[65] R. Alexander 和 D. Giannakis，“利用核类比技术预测非线性时间序列的算子理论框架”，《物理学*D*》，第 409 卷，第 132520 页，2020年。[66] R. R. Coifman 和 S. Lafon，“扩散映射”，*Appl. Comput. Harmon. Anal.*，第 21 卷，第 5–30 页，2006年。[67] M. Kac，“论某些 Wiener 泛函的分布”，*Trans. Amer. Math. Soc.*，第 65 卷，第 1–13 页，1949年。[68] B. Øksendal，《随机微分方程》，第 6 版。施普林格，2003年。[69] I. Karatzas 和 S. Shreve，《布朗运动与随机微积分》，第 2 版。施普林格，1991年。[70] C. E. Rasmussen 和 C. K. I. Williams，《机器学习中的高斯过程》。麻省理工学院出版社，2006年。

[71] L.H¨ormander，次椭圆二阶微分方程，《数学学报》，119（1967），第 147–171 页。[72] L. P. Rothschild 和 E. M. Stein，次椭圆微分算子与幂零群，《数学学报》，137（1976），第 247–320 页。[73] O. A. Oleˇınik 和 E.V. Radkeviˇc，具有非负特征形式的二阶方程，美国数学会，1973年。[74] F.H´erau 和 F. Nier，具有高次势的 *Fokker–Planck* 方程的各向同性次椭圆性与趋于平衡，《数学分析与应用档案》，171（2004年），第 151–218 页。