随机热力学-2：Stochastic Process in Continuous State Space

#StochasticThermaldynamics

Evolution of Propagator

现在考虑连续状态空间，系统的状态以矢量 $\vec{X}(t)$ 表示。我们这样定义一个连续路径：

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\Delta \boldsymbol{x}| > \epsilon} \mathrm{d}\boldsymbol{x} \;\; p(\boldsymbol{x} + \Delta \boldsymbol{x}, t + \Delta t | \boldsymbol{x}, t) = 0$$

而对于我们之前的离散路径，有：

$$w(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}', t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} p(\boldsymbol{x}, t + \Delta t | \boldsymbol{x}', t)$$

我们希望知道系统的一个可观测量随着时间的演化：

$$\begin{aligned}
\partial_t \mathbb{E}[f](t) &= \partial_t \int \mathrm{d}x f(x) p(x, t | x_0, t_0) \\
&= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int \mathrm{d}x f(x) (p(x, t + \Delta t | \cdot) - p(x, t | \cdot)) \\
&= \lim_{\delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int \mathrm{d}x f(x) \left(\int \mathrm{d}x' p(x, t + \Delta t | x', t) p\left(x', t | \cdot\right) - \int \mathrm{d}x' p(x', t + \Delta t | x, t) p(x,
\end{aligned}$$

在第三步中我们使用了 CK 方程。

我们先考虑一个简单的情形，这里轨道不是连续的。所谓跳过程：

$$w(x'|x, t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} p(x', t + \Delta t | x, t)$$

那么：

$$\partial_t \mathbb{E}[f] = \int \mathrm{d}x f(x) \int \mathrm{d}x' (w(x|x', t) p(x', t|\cdot) - w(x'|x, t) p(x, t|\cdot))$$

从中读出概率密度的演化：

$$\partial_t p(x, t|\cdot) = \int \mathrm{d}x' (w(x|x', t) p(x', t|\cdot) - w(x'|x, t) p(x, t|\cdot))$$

这个方程和主方程非常相似，你从所有 x' 态获得概率，从 x 态损失概率。

再举一个例子，考虑一个过程：

$$A_i(x,t) = \frac{1}{\Delta t}\int \mathrm{d}x'(x_i' - x_i)p(x',t+\Delta t|x,t) := \frac{\mathbb{E}(\Delta x_i)}{\Delta t}$$

$$B_{ij}(x,t) = \frac{1}{\Delta t}\int \mathrm{d}x'(x_i' - x_i)(x_j' - x_j)p(x',t+\Delta t|x,t) = \frac{\mathbb{E}(\Delta x_i \Delta x_j)}{\Delta t}$$

并假设这个过程的更高阶矩单位时间增量几乎为 0。我们仍然想看可观测量的期望随时间的演化：

$$\partial_t \mathbb{E}[f] = \frac{1}{\Delta t}\left(\int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x' f(x')p(x',t+\Delta t|x,t)p(x,t|\cdot) - \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x' f(x)p(x',t+\Delta t|x,t)p(\right.$$

在这一步中，我们只是换了一下第一项里面 x 和 x' 的名字。接下来对 $f(x')$ 在 x 处进行 Taylor 展开，零阶项和后面抵消了，下面考虑后面的部分：

$$\begin{aligned}\partial_t \mathbb{E}[f] &= \frac{1}{\Delta t}\left(\int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x' f(x')p(x',t+\Delta t|x,t)p(x,t|\cdot) - \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x' f(x)p(x',t+\Delta t|x,t)p(\right.\\ &= \frac{1}{\Delta t}\int \mathrm{d}x\mathrm{d}x'((x_i'-x_i)\partial_i f|_x + (x_i'-x_i)(x_j'-x_j)\partial_i\partial_j f|_x + \cdots)p(x',t+\Delta t|x,t)p(x,\\ &= \int \mathrm{d}x((\partial_i f)A_i(x,t)p(x,t|\cdot) + \frac{1}{2}(\partial_i\partial_j f)B_{ij}(x,t)p(x,t|\cdot))\end{aligned}$$

使用分部积分，使得 f 暴露出来，就得到：

$$\partial_t p(x,t|\cdot) = -\partial_i(A_i p(x,t|\cdot)) + \frac{1}{2}\partial_i\partial_j(B_{ij}p(x,t|\cdot))$$

这是扩散过程中传播子的演化方程，称为 Fokker Planck 方程。

Brownian Motion and OU Process

下面举几个例子。首先考虑布朗运动。假设我们知道分布函数是：

$$p(x,t|\cdot) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t-t_0)}}\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4D(t-t_0)}\right)$$

不难从中给出：

$$A = 0, B = 2D$$

更高阶的矩的增量是 0。此时 FP 方程退化到热方程。另一个例子是随机谐振子，记 $U(x)=\dfrac{1}{2}kx^2$，在考虑系统的确定性演化时，我们将系统简化为过阻尼系统，所以有：

$$-kx=(6\pi\eta R)\dot{x}$$

考虑以上确定性动力学叠加了布朗运动，扩散系数为 D，所以我们有 $A=-\gamma x$, $B=2D$ 。FP 方程是：

$$\partial_t p=\partial_x(\gamma x\cdot p)+D\partial_x^2 p$$

下面我们借助傅里叶变换求解它，定义：

$$\phi(k,t)=\int \mathrm{d}x\exp(ikx)p(x,t|\cdot)$$

对上面的 PDE 左右两侧进行 Fourier 变换得到：

$$\partial_t\phi(k,t)+\gamma k\partial_k\phi(k,t)=-Dk^2\phi(k,t),\ \phi(k,t=0)=\exp(ikx_0)$$

这样的方程可以使用所谓特征线法求解，也就是指定 k 的"流线" $k(t)$，这样，原本的坐标 (k,t) 被换成新的坐标 (k_0,t)。定义：

$$\phi(t):=\phi(k(t),t)$$

写出其全微分：

$$\frac{\mathrm{d}\phi(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial\phi}{\partial k}\frac{\mathrm{d}k(t)}{\mathrm{d}t}+\frac{\partial\phi}{\partial t}$$

若我令 $\dfrac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t}=\gamma k$，那么我有：

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}t}=-Dk^2\phi,\ \frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t}=\gamma k$$

所以我们得到了：

$$k(t)=k_0\exp(-\gamma t),\ \phi(t)=\phi(0)\exp\left(-D\int_0^t\mathrm{d}t'k^2(t')\right)=\exp\left(ik_0x_0-\frac{D}{2\gamma}k_0^2(\exp(2\gamma t)-1\right.$$

把坐标变回去，有：

$$\phi(t)=\exp\left(ik\exp(-\gamma t)x_0-\frac{1}{2}\frac{D}{\gamma}k^2(1-\exp(-2\gamma t))\right)$$

这是高斯分布的特征函数，均值是 $\mathbb{E}[x] = x_0 \exp(-\gamma t)$，方差是 $\mathrm{Var}[x_0] = \frac{D}{\gamma}(1 - \exp(-2\gamma t))$。在 $t \to \infty$ 时系统应处于平衡态，此时有能均分定理：

$$\frac{1}{2} k_B T = \frac{1}{2} m \mathbb{E}[x^2]$$

也就是说在振动自由度上有 $\frac{1}{2} k_B T$ 的能量。所以我们有：

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta R}$$

这被称为 Einstein-Stokes 关系。

Inverse Problem & MCMC Sampling

下面我们考虑如何从数据中推断模型参数。一种常见的方式是 Bayes：

$$p(\theta|D) = \frac{1}{p(D)} p(D|\theta) p(\theta)$$

所以假如我们想推断参数，我们要做的事情就是最大似然估计。我们现在可能希望求解：

$$\mathbb{E}[f(\theta)] = \int \mathrm{d}\theta\, p(\theta|D) f(\theta) := \int \mathrm{d}\theta\, p(\theta) f(\theta)$$

上面这个东西由于高维积分而难以计算，所以我们一般做的是 Monte-Carlo 积分 $\sum \frac{1}{N} f(\theta^i)$。我们通常构建一个马氏链，让其稳态概率变成 $p(\theta)$。如何设计这样的马氏链呢？显然我们需要指定 $p(\theta'|\theta)$，以下算法可以做到：

- 选择任意 $\theta^{(0)}$
- 循环：
  - Propose 新的 $\theta^{(i)}$，根据 $q(\theta^{(i)}|\theta^{(i-1)})$
  - 根据 $A(\theta^{(i)}|\theta^{(i-1)}) = \min(\Lambda, \alpha)$ 接受新的 $\theta^{(i)}$。
    我们要给出这里 q, α。这里我们希望通过 q 让系统探索整个状态空间，而在 α 中编码系统的后验概率：

$$\alpha = \frac{p(\theta')q(\theta|\theta')}{p(\theta)q(\theta'|\theta)}$$

Λ 是可以调节的参数。你可以证明这里的链的稳态分布就是我们想要的 $p(\theta)$ 。上面这种方法可能生成出太多被 Reject 的数据点，所以有一种改进称为 Hamiltonian Monte Carlo，就是把每个态的后验概率和能量对应起来：

$$p(\theta) = \frac{1}{Z}\exp(-H(\theta))$$

从而：

$$\alpha = \exp(-\beta \Delta H)$$

我们也许可以把这里的 H 和标准的理论力学中的 H 联系一下。考虑标准的哈密顿量：

$$H(\theta, v) = K(v) + E(\theta)$$

其中 $K(v) = \frac{1}{2}v^T M^{-1} v$，根据我们刚才指定的，有 $E(\theta) = -\log p(\theta)$。我们可以根据这个哈密顿量从相空间中采样，那么：

$$p(\theta, v) = \frac{1}{Z}\exp(-K(v) - E(\theta)) = \frac{1}{Z}\mathcal{N}(v|0, M)p(\theta)$$

首先，我们随机采样 v 使得 $p(v) \sim \mathcal{N}(v|0, M)$，而后根据哈密顿方程将系统演化到 (θ', v')，而后再随机生成一个速度 v，再次演化一段时间，...，不断重复以上步骤。那么我们实际上需要求两处接受概率：一个是演化到一个位置时，重新指定速度的接受概率；另一个是演化前->演化后的接受概率。重新接受指定速度的概率是：

$$\frac{\mathcal{N}(v')}{\mathcal{N}(v)} \cdot \frac{\mathcal{N}(v)}{\mathcal{N}(v')} = 1$$

演化前->演化后的接受概率也是 1 .你可以认为这是哈密顿系统的能量守恒和保相体积两个特性共同导致的。

Example: 2 State System, Chemotaxis

趋化性：指细胞根据环境中某些化学药物的浓度运动的现象。下面对这种现象进行建模。我们考虑一个感知系统，有一种蛋白质能够把细菌的驱动马达的转向从顺时针转向逆时针。简单起见，考虑 1 维运动，细菌能做两件事：要么转换它的移动方向，要么移动。转换移动方向的时间尺度大约是 $\tau_{tumble} \sim \frac{1}{10}\ sec.$，而移动的时间尺度大约是 $\tau_{run} \sim 1\,\mathrm{sec}$。以 $\sigma = \pm 1$ 表示细菌的移动方向；以 $\alpha_+(x)$ 表示细胞在 x 处由 $\sigma = +1$

变成 $\sigma=-1$ 的概率，$\alpha_-(x)$ 亦然。以 $p_\pm(x,t)$ 表示细菌向右/左移动的概率。演化方程是：

$$\begin{aligned}\partial_t p_+(x,t) &= -v_0\partial_x p_+(x,t)-\alpha_+ p_+(x,t)+\alpha_-(x)p_-(x,t)\\ \partial_t p_-(x,t) &= +v_0\partial_x p_-(x,t)-\alpha_- p_-(x,t)+\alpha_+(x)p_+(x,t)\end{aligned}$$

考虑 $p(x,t)=p_++p_-$ 和 $J(x,t)=v_0(p_+-p_-)$，这两个量之间的关系就是流守恒方程：

$$\partial_t p(x,t)=-\partial_x J(x,t)$$

再考虑：

$$\partial_t J=-v_0^2\partial_x p-(\alpha_++\alpha_-)J+v_0(\alpha_++\alpha_-)p$$

你可以认为这里的第三项是 Drift，第二项是 Damping，第一项将会对应于 Diffusion（后面我们会看到这一点）。由于扩散的驱动系数正比于 v_0^2，你可以认为系统有 $D_{EFF}\sim\frac{v_0^2}{\alpha_++\alpha_-}$（驱动/阻尼）的扩散系数；扩散这一项达到平衡的时间大概是 $\tau_{DIFF}\sim\frac{L^2}{D_{EFF}}$，$L$ 是某个特征长度。我们观测到细菌每次单向行走的长度尺度大约是 $20\mu m$，所以我们可以设置 $L\sim 100\mu m$，利用以上数据马上算出 $\tau_{DIFF}\sim 25s$。也就是说 p 的扩散过程非常慢，而 J 的变化特征时间 $\frac{1}{\alpha_++\alpha_-}$ 却非常快（$v_0\ll 1$），所以我们可以采用所谓绝热假设：

$$\partial_t J\approx 0$$

所以立刻解出：

$$J(x,t)\approx\frac{1}{\alpha_++\alpha_-}(-v_0^2\partial_x p+v_0p):=D_{EFF}\partial_x p+v_{EFF}p$$

那么我们就得到 FP 方程了。

细菌的感知实际上是读取了其轨迹上的化学物质浓度。设这个浓度 $c(x)$，那么：

$$\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}t}\approx\dot{x}\partial_x c=v_0\sigma(t)\partial_x c$$

我们设置：

$$\alpha_\pm(x)=\alpha_0(1\mp\chi v_0\partial_x c)$$

所以 $D_{EFF} \approx \frac{v_0^2}{2\alpha_0}, v_{EFF} \approx \chi \frac{v_0}{2\alpha_0} \partial_x c$。所以从这里我们会发现细菌沿着浓度梯度行走。

有一个更复杂的情况是 $c(x,t)$，化学物质的浓度依赖于时间，并且：

$$\partial_t c = D_c \partial_x^2 c - kc + \mathcal{F}(p)$$

也就是说这种化学物质由细菌自身产生。如果我允许 $\chi = \chi(c)$，这个模型称为 Keller-Segel Model。我们写下这个模型：

$$\partial_t \rho = -\nabla \cdot ((\chi(c)\nabla c)\rho) + D\nabla^2 \rho, \partial_t c = D_c \nabla^2 c - kc + f[\rho]$$

这个模型没有精细平衡，甚至远离稳态，因为生物的感知机制需要外界注入能量。

现在考虑一个叫 Schnitzer Model 的东西。

$$\partial_t p_+ = -\partial_x (v(x)p_+) - \frac{1}{2}\alpha(x)p_+ + \frac{1}{2}\alpha(x)p_-$$

$$\partial_t p_- = -\partial_x (v(x)p_-) - \frac{1}{2}\alpha(x)p_- + \frac{1}{2}\alpha(x)p_+$$

定义 $p = p_+ + p_-, J = v(x)[p_+ - p_-]$，其实只是把上面的模型的 $+/-$ 切换改成对称的。使用绝热近似得到：

$$\partial_t p = \partial \left(\frac{v(x)}{\alpha(x)} \partial_x (v(x)p) \right)$$

流量：

$$J = -\frac{v^2(x)}{\alpha(x)} \partial_x p(x) - p(x) \frac{v(x)}{\alpha(x)} \partial_x v(x)$$

若 $\alpha(x) = \alpha_0$，现在解出系统的稳态：

$$p_{ss}(x) \propto \frac{1}{v(x)}$$

这很直观：密度聚集在速度更慢的地方。

考虑另一个模型，我们人为地制造这种拥挤效应：

$$\partial_t \rho(x,t) = -\partial_x J(x,t); J(x,t) = -v(\rho)\partial_x (\rho v(\rho))$$

且 $v(\rho)$ 随着 ρ 的增大而减小，那么：

$$J(x,t) = -(v^2(\rho) + \rho v(\rho) v'(\rho))\partial_x \rho := -D_{EFF}(\rho)\partial_x \rho$$

有趣的事情是在 $D_{EFF}(\rho) < 0$ 的时候，会出现反向扩散，此时，粒子从浓度低的地方运动到浓度高的地方。（此时 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}(\rho v(\rho)) < 0$））一个简单的例子是 $v(\rho) = v_0 \left(1 - \frac{\rho}{\rho^\star}\right)$，则反向扩散在 $\rho > \frac{1}{2}\rho^\star$ 时出现。这种现象称为 Phase-Seperation，因为系统会形成一些"团块"。

上面的模型可以被写成：

$$J(x,t) = -M(\rho)\partial_x \mu(\rho), M(\rho) = \rho v^2, \mu_{eff} = \ln\rho + \ln v(\rho)$$

但是 $M(\rho), \mu_{eff}(\rho)$ 可以取成其他的函数。这里的 μ_{eff} 可以被视为化学势。考虑自由能：

$$F_{eff} = \int \mathrm{d}x \left[\rho \ln\rho - \rho + \int \mathrm{d}s \ln v(s)\right]$$

它对密度的泛函导数应当被视为化学势（注意：这是对 $\mu = \frac{\partial F}{\partial N}|_{T,V}$ 的推广），不难验证 $\frac{\delta F_{eff}}{\delta\rho} = \mu_{eff}$。所以动力学方程写成：

$$\partial_t \rho = \partial_x \left[M(\rho)\partial_x \frac{\delta F_{eff}}{\delta\rho}\right]$$

这是一个 Wasserstein 梯度流方程，只要我们的系统的流量能写成这样的形式 $J(x,t) = -M(\rho)\partial_x \mu_{eff}(\rho)$，那么系统的运动就是在最小化一个能量泛函。不难验证 $\frac{\mathrm{d}F_{eff}}{\mathrm{d}t} < 0$，所以稳态就是 F_{eff} 最小的时候。我们说这是一个"有效"热力学问题，是因为这个系统和标准热力学系统有相同的平衡条件（F_{eff} 最小）。

Langevin Equation

无论对于离散还是连续系统，我们都应该有一个系综表述和一个单体表述。现在我们给出对于连续状态空间的单体表述。考虑悬浮在液体中的粒子，它不断受到液体分子的撞击。根据牛顿动力学方程：

$$m\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}v(t) = -m\zeta v(t)$$

其中 $m\zeta = 6\pi\eta R$。如果只有这部分，速度将指数衰减。但是这显然不对，根据能均分定理我们必须有：

所以我们的动力学方程缺了一项：

$$m\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}v(t) = -m\zeta v(t) + \eta(t)$$

这里的 $\eta(t)$ 是随机力，这个方程称为郎之万方程。有如下基本假设：

$$\mathbb{E}[\eta(t)] = 0$$

这使得我们在取平均的时候可以恢复确定性动力学。以及：

$$\mathbb{E}[\eta_i(t)\eta_j(t')] = 2\Gamma\delta_{ij}\delta(t-t')$$

这个力各向同性、在时间上短程相关。记 $\Lambda = \frac{1}{\sqrt{2\Gamma}}\eta$。那么郎之万方程的解应该是：

$$v(t) = v_0\exp(-\zeta t) + \frac{\sqrt{2\Gamma}}{m}\int_0^t \exp(-\zeta(t-\tau))\Lambda(\tau)\mathrm{d}\tau$$

（注：你可以认为我们使用积分因子法推出了这个式子，也就是先将原方程变形为 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(v(t)\exp(-\zeta t)) = \frac{1}{m}\exp(-\zeta t)\eta(t))$ ，而后得到上式）

我们现在利用这个式子计算 v 的相关函数：

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(v_i(t)v_j(t')) &= v_{0i}v_{0j}\exp(-\zeta(t+t')) + \frac{2\Gamma}{m^2}\int \mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau'\mathbb{E}(\Lambda_i(\tau)\Lambda_j(\tau'))\exp(-\zeta(t-\tau))\exp(-\zeta(\\ &= \frac{\Gamma}{\zeta m^2}\exp(-\zeta|t-t'|)\delta_{ij} + \left(v_{0i}v_{0j} - \frac{\Gamma}{\zeta m^2}\right)\exp(-\zeta(t+t')) \\ &\approx \frac{\Gamma}{\zeta m^2}\exp(-\zeta|t-t'|)\delta_{ij}\end{aligned}$$

其中利用了 $t, t' \gg \zeta^{-1}$ 的假设。所以我们可以看到，速度的关联随着时间指数下降。与前面的能均分定理比较，可以给出

$$\Gamma = m\zeta k_B T = \gamma k_B T$$

介观粒子受到的摩擦和撞击都来自于流体分子，所以可想而知这二者不是独立的。这个关系称为涨落耗散关系。现在我们考虑粒子位置的演化，我们先不讨论随机微积分我们只计算统计量：

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}((\Delta x)^2) &= \int_0^t \mathrm{d}\tau \int_0^t \mathrm{d}\tau' \mathbb{E}(v(\tau)v(\tau')) \\
&= 2\sharp \mathrm{Dim}\, \frac{k_B T}{m\zeta}\left(t + \frac{1}{\zeta}(\exp(-\zeta t) - 1)\right)
\end{aligned}
$$

$t \gg \zeta^{-1}$ 时，基本上 $\mathbb{E}[x^2] = 2\sharp Dt, D = \dfrac{k_B T}{6\pi\eta R}$，这个是我们做随机谐振子时得到的 Einstein-Stokes 关系；而在 $t \ll \xi^{-1}$ 时，$\mathbb{E}[x^2] = \dfrac{\sharp k_B T}{m} t^2$。

Fokker Planck for Langevin Particles

现在我们假设 $\eta(t)$ 是高斯分布的随机变量。考虑：

$$
\begin{aligned}
m\Delta v &= m(v(t+\Delta t) - v(t)) \\
&= -m\zeta v(t)\Delta t + \Delta W(t, \Delta t)
\end{aligned}
$$

$$
\Delta W(t, \Delta t) := \int_t^{t+\Delta t} \mathrm{d}\tau \eta(\tau)
$$

由于 $\eta(t)$ 被假设为服从高斯，那么 ΔW 必然服从高斯。我们看看它的二阶矩：

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}[\Delta W_k \Delta W_j] &= \int_t^{t+\Delta t}\int_t^{t+\Delta t} \mathrm{d}\tau \mathrm{d}\tau' \mathbb{E}[\eta_k(\tau)\eta_j(\tau)] \\
&= 2m\zeta k_B T \delta_{kj} \Delta t
\end{aligned}
$$

所以前面的方程中，第一项是 Δt 的一阶小量，第二项则是“半阶小量”。这是一个非常不寻常的东西！在之前的离散格式中，我们从未出现“半阶小量”。
所以，$p(v_i', t+\Delta t | v_i, t)$ 的均值是 $-\zeta v(t)\Delta t$，方差是 $2\zeta k_B T \Delta t$，据此很容易直接写出其分布。
其中 $\sigma = 2m\zeta k_B T$。下面构建 Fokker Planck 方程：

$$
\begin{aligned}
A_i &= \frac{\mathbb{E}[\Delta v_i]}{\Delta t} \\
&= \frac{1}{\Delta t}\int \mathrm{d}v' \Delta v_i p(v', t+\Delta t | v, t) \\
&= \frac{1}{\Delta t}\mathbb{E}[-\xi v_i \Delta t + \frac{1}{m}\Delta W_i]|_{v, \Delta t} \\
&= -\zeta v_i
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
B_{ij} &= \frac{1}{\Delta t}\mathbb{E}[\Delta v_i \Delta v_j] \\
&= \frac{1}{\Delta t}\int \mathrm{d}v' \Delta v_i \Delta v_j p(v', t+\Delta t|v, t) \\
&= \frac{1}{\Delta t}\mathbb{E}[\Delta v_i \Delta v_j]|_{v,\Delta t} \\
&= \frac{2k_B T\zeta}{m}\delta_{ij}
\end{aligned}
$$

那么立刻得到 FPE：

$$
\partial_t p(v,t|\cdot) = \partial_v(\zeta v p(v,t|\cdot)) + \frac{k_B T\zeta}{m}\partial_v^2 p(v,t|\cdot)
$$

容易得到它的稳态：

$$
p_{ss}(v) = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{mv^2}{k_B T}\right)
$$

现在让我们研究过阻尼的情形，此时考虑位置随着时间的演化：

$$
m\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} + \zeta m\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = -\nabla u + \eta
$$

假设粒子密度非常小，第一项可以忽略。我们把方程重新写成：

$$
\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = -\mu\nabla u + \xi
$$

前面的扩散系数 $D = \mu k_B T$，$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = -\mu\nabla u + \sqrt{2D}\Lambda$。为了导出 x 的 FPE，我们需要计算 Δx 的一阶、二阶矩：

$$
\begin{aligned}
A_i &= \frac{1}{\Delta t}\mathbb{E}[\Delta x_i] \\
&= \mu F_i := -\mu\partial_i u
\end{aligned}
$$

$$
B_i = 2D\delta_{ij}
$$

那么得到：

$$
\partial_t p(x,t|\cdot) = -\nabla(\mu F(x)p(x,t|\cdot)) + D\nabla^2 p(x,t|\cdot)
$$

长时间时，稳态分布是：

$$p_{ss} = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{u(x)}{k_B T}\right)$$