Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών
Τομέας Μαθηματικών

Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών
"Εφαρμοσμένες Μαθηματικές Επιστήμες"

Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία : Ολοκληρώματα Τροχιών και Εφαρμογές στην Κβαντομηχανική

του Κυριάκου Στρατουρά

Επιβλέπων : Μιχάλης Λουλάκης, Αν. Καθηγητής

Οκτώβριος, 2017
Αθήνα

Περίληψη

Ο σκοπός αυτής της εργασίας είναι η μελέτη ζητημάτων που αφορούν τον μαθηματικό φορμαλισμό της Κβαντομηχανικής. Πιο συγκεκριμένα θα μελετήσουμε τα ολοκληρώματα κατά μονοπάτια (Path Integrals) όπως τα όρισε ο Feynman ,θα δούμε ποια είναι η φυσική τους ερμηνεία και πως όλα αυτά συνδέονται, μέσω του θεωρήματος Feynman-Kac, με τη θεωρία των διαχύσεων *Itô* και τις στοχαστικές ανελίξεις.

Στα πρώτα κεφάλαια της εργασίας θα ασχοληθούμε με τη θεωρία των στοχαστικών ανελίξεων και διαφορικών εξισώσεων, ενώ στη συνέχεια θα δούμε τη βασική θεωρία της Κβαντομηχανικής και πως κατασκευάζουμε τα Path Integrals. Θα δούμε διάφορες εφαρμογές της θεωρίας και πιο συγκεκριμένα θα εστιάσουμε στην περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να εκφράσω τις θερμές μου ευχαριστίες στον καθηγητή μου, κ. Μιχάλη Λουλάκη για την καθοδήγηση και την υποστήριξή του κατά τη διάρκεια της εκπόνησης της εργασίας αυτής, αλλά και για την ευκαιρία που μου έδωσε για να μελετήσω ένα πολύ ενδιαφέρον κεφάλαιο των Μαθηματικών.

Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένειά μου και τους φίλους, για την πολύτιμη βοήθεια και υποστήριξη τους.

Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Ιστορική Αναφορά

Ο Richard Feynman (1918-1988) ήταν ένας Αμερικανός θεωρητικός φυσικός, που έγινε γνωστός για την συνεισφορά του στην Κβαντική Ηλεκτροδυναμική και στη θεμελίωση της Κβαντομηχανικής μέσω των Path Integrals . Είχε προτείνει, δηλαδή, ένα εναλλακτικό τρόπο για να μελετήσει κανείς τα ζητήματα που αφορούν την Κβαντομηχανική. Είχε ασχοληθεί με τα Path Integrals κατά τη διάρκεια του διδακτορικού του και η διατριβή του είχε τίτλο " The Principle of Least Action in Quantum Mechanics" (1942) . Συνειδητοποίσε δηλαδή ότι μπορεί κάποιος να γενικεύσει την ιδέα της αρχής της ελάχιστης δράσης (που ερμηνεύει την κλασική μηχανική) και να πάρει κάτι αντίστοιχο που θα ερμηνεύει την Κβαντική Μηχανική. Η θεωρία της Κβαντικής Ηλεκτροδυναμικής ήταν το επόμενο βήμα. Υπήρχαν τεχνικά ζητήματα λόγω της εμφάνισης απείρων ολοκληρωμάτων τα οποία ήταν εμπόδιο στην πλήρη κατανόηση της θεωρίας. Τελικά, με τη βοήθεια του Mark Kac (1914-1984), ο οποίος ήταν Αμερικανός μαθηματικός με καταγωγή από την Πολωνία και του οποίου τα ενδιαφέροντα ήταν η θεωρία πιθανοτήτων, κατάφεραν να αποδείξουν αυστηρά τι είναι μια άθροιση πάνω στην ιστορία της κίνησης ενός κβαντικού σωματιδίου. (Ο Mark Kac δούλευε ανεξάρτητα αρχικά για μελετήσει το ζήτημα από την σκοπιά της θεωρίας των στοχαστικών ανελίξεων.) Έδειξαν ότι οι παραβολικοί μερικοί διαφορικοί τελεστές μπορούν να γραφούν ως τέτοια αθροίσματα και ότι ουσιαστικά αντιπροσωπεύουν μια μέση τιμη, το οποίο έγινε μέσω του θεωρήματος Feynman-Kac . Είχαν συνειδητοποιήσει ότι δεν ήταν ένα αποτέλεσμα που αφορούσε αποκλειστικά την Κβαντομηχανική, αλλά είχε πληθώρα εφαρμογών στην θεωρία των στοχαστικών ανελίξεων.

1.2 Στοιχεία Θεωρίας Πιθανοτήτων και Στοχαστικών Ανελίξεων

Κατά την διάρκεια της εργασίας αυτής ένα βασικό αντικείμενο μελέτης θα είναι οι Στοχαστικές Ανελίξεις και Διαφορικές Εξισώσεις, οπότε θα ήταν χρήσιμο να παραθέσουμε κάποιους ορισμούς, θεωρήματα και αποτελέσματα τα οποία θα χρησιμοποιηθούν στην συνέχεια.

Ορισμός 1.2.1. *Έστω ένα σύνολο Ω. Μια οικογένεια υποσυνόλων του $\mathcal{F}$ θα λέγεται σ- άλγεβρα εάν ισχύουν τα ακόλουθα:*
α) $\emptyset \in \mathcal{F}$
β) Αν $F \in \mathcal{F}$, τότε $F^c \in \mathcal{F}$
γ) Αν $\{A_n\}_{n=1}^{\infty} \subset \mathcal{F}$, τότε $\cup_{n=1}^{\infty} A_n \in \mathcal{F}$

Ορισμός 1.2.2. *Έστω $(\Omega, \mathcal{F})$ μετρήσιμος χώρος. Μια $\mathbb{P} : (\Omega, \mathcal{F}) \to [0, 1]$ θα λέγεται μέτρο πιθανότητας, αν :*
α)$\mathbb{P}(\emptyset) = 0$
β)$\mathbb{P}(\Omega) = 1$
γ) Αν $\{A_n\}_{n=1}^{\infty} \subset \mathcal{F}$, με $A_i \cap A_j = \emptyset$ για $i \neq j$, τότε $\mathbb{P}(\cup_{n=1}^{\infty} A_n) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}(A_n)$

Έστω $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ ένας χώρος πιθανότητας.

Ορισμός 1.2.3. *Μια συνάρτηση $X : \Omega \to \mathbb{R}^n$ θα καλείται τυχαία μεταβλητή, εάν είναι $\mathcal{F}-$μετρήσιμη.*

Ορισμός 1.2.4. *Μια παραμετρικοποίηση τυχαίων μεταβλητών $\{X_t\}_{t \in T}$ σε ένα χώρο πιθανότητας $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ είναι μια στοχαστική ανέλιξη. Συνήθως $T = [0, \infty)$.*

Παρατηρούμε ότι εάν σταθεροποιήσουμε ένα $t \in T$, παίρνουμε μια τ.μ. $\omega \to X_t(\omega), \omega \in \Omega$.

Ενώ εαν σταθεροποιήσουμε ένα $\omega \in \Omega$, παίρνουμε μια συνάρτηση $t \to X_t(\omega), t \in T$.
Η συνάρτηση αυτή λέγεται και μονοπάτι της ανέλιξης, για $\omega \in \Omega$

Ορισμός 1.2.5. *Έστω $\mathcal{A}$ μια οικογένεια υποσυνόλων του Ω. Τότε η μικρότερη σ-άλγεβρα που περιέχει την $\mathcal{A}$ υπάρχει πάντοτε. Ορίζεται ως η τομή όλων των σ-αλγεβρών που την περιέχουν και συμβολίζεται με $\sigma(\mathcal{A})$. Ονομάζεται και η παραγόμενη σ-άλγεβρα από την $\mathcal{A}$.*

Ορισμός 1.2.6. *(Ανεξαρτησία ενδεχομένων και τυχαίων μεταβλητών)*
Έστω $A, B \in \mathcal{F}$. Θα λέμε ότι τα ενδεχόμενα A και B είναι ανεξάρτητα, εαν :

$$\mathbb{P}(A \cap B) = \mathbb{P}(A)\mathbb{P}(B)$$

Εάν τώρα έχουμε μια $\{A_i\}_{i\in\mathbb{I}} \subset \mathcal{F}$, θα λέμε ότι η οικογένεια αποτελείται από ανεξάρτητα ενδεχόμενα, εάν για κάθε επιλογή πεπερασμένων υποσυνόλων της $\{A_{i_1}, A_{i_2}, ..., A_{i_k}\}$, ισχύει ότι :

$$\mathbb{P}(\cap_{n=1}^{k} A_{i_k}) = \prod_{n=1}^{k} \mathbb{P}(A_{i_k})$$

Μια οικογένεια τυχαίων μεταβλητών $\{X_i\}_{i\in\mathbb{I}}$ θα λέγεται ανεξάρτητη, εάν η παραγόμενη οικογένεια σ-αλγεβρών $\{\sigma(X_i)\}_{i\in\mathbb{I}}$ είναι ανεξάρτητη.

Ορισμός 1.2.7. *Οι κατανομές πεπερασμένης διάστασης μιας ανέλιξης $\{X_t\}_{t\in T}$ ορίζονται ως οι κατανομές των διανυσμάτων$(X_{t_1}, X_{t_2}, ..., X_{t_n})$, όπου $n \in \mathbb{N}\backslash\{0\}$ και $t_1, t_2, ..., t_n \in T$ διαφορετικοί ανα δύο.*

Ορισμός 1.2.8. *Έστω $\{\mathcal{N}_t\}_{t\geq 0}$ αύξουσα οικογένεια σ-αλγεβρών. Μια στοχαστική ανέλιξη $\{X_t\}_{t\geq 0}$ θα καλείται $\mathcal{N}_t$ προσαρμοσμένη, εάν για κάθε $t \geq 0$, η X_t είναι $\mathcal{N}_t$ μετρήσιμη.*

Ορισμός 1.2.9. *Έστω X, Y τυχαίες μεταβλητές ορισμένες σε έναν χώρο πιθανότητας $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$. Θα λέμε ότι η Y είναι μια μορφή ή αντιπρόσωπος της X, συμβολικά $X \sim Y$, εάν $\mathbb{P}(X = Y) = 1$*

Ορισμός 1.2.10. *Μια διήθυση στον χώρο $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ θα καλείται μια οικογένεια σ-αλγεβρών $\mathcal{M} = \{\mathcal{M}_t\}_{t\geq 0}$ όταν για κάθε $0 \leq s < t \implies \mathcal{M}_s \subset \mathcal{M}_t$. Δηλαδή όταν είναι μια αύξουσα οικογένεια σ-αλγεβρών.*

Ορισμός 1.2.11. *Μια στοχαστική ανέλιξη $\{X_t\}_{t\geq 0}$ στον χώρο $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ θα καλείται $Martingale$ ως προς μια διήθυση $\{\mathcal{N}_t\}_{t\geq 0}$ και το μέτρο πιθανότητας $\mathbb{P}$, αν :*
(α) Η X_t είναι $\mathcal{N}_t$ μετρήσιμη για κάθε $t \geq 0$.
(β)$E(|X_t|) < \infty$, για κάθε $t \geq 0$.
(γ)$E[X_s|\mathcal{N}_t] = X_t$, για κάθε $s \geq t$.
Εάν στην (γ) έχουμε αντι για ισότητα, $\geq$, τότε λέμε οτι η στοχαστική ανέλιξη είναι ένα submartingale, ενώ αν είναι $\leq$, supermartingale.

Ορισμός 1.2.12. *Έστω $\{\mathcal{N}_t\}_{t\geq 0}$ μια αύξουσα ακολουθία σ-αλγεβρών. Μια συνάρτηση $T : \Omega \to [0, \infty]$ θα καλείται χρόνος διακοπής (ως προς την $\{\mathcal{N}_t\}_{t\geq 0}$), εαν $\{\omega : \tau(\omega) \leq t\} \in \mathcal{N}_t, \ \forall t \geq 0$.*

(Διαισθητικά, ο T θα αποτελεί χρόνο διακοπής αν μπορούμε να αποφανθούμε για το ενδεχόμενο $t \leq T$ έχοντας ως πληροφορία την $\{\mathcal{N}_t\}_{t\geq 0}$)

Ορισμός 1.2.13. *Η ανέλιξη* $(X_t)_{t\geq 0}$ *λέγεται local martingale ως προς τη διήθηση* $(\mathcal{F}_t)_{t\geq 0}$ *αν υπάρχει αύξουσα ακολουθία* $(\tau_n)_{n\geq 1}$ *χρόνων διακοπής ώστε:*
(α) $\mathbb{P}[lim_n \tau_n = \infty] = 1$
(β) Για κάθε $n \geq 1$ *η σταματημένη ανέλιξη* $(X_t \wedge \tau_n)_{t\geq 0}$ *είναι martingale ως προς την* $(\mathcal{F}_t)_{t\geq 0}$.
Επειδή $X_t = lim_n (X_t \wedge \tau_n)$ *, η* X *είναι προσαρμοσμένη στην* $(\mathcal{F}_t)_{t\geq 0}$. *Κάθε martingale είναι local martingale, το αντίστροφο όμως δεν ισχύει γενικά.*

1.3 Στοιχεία από Θεωρία Τελεστών

Σε αυτή την παράγαφο θα δούμε κάποιους βασικούς ορισμούς και αποτελέσματα στη Θεωρία Τελεστών που θα μας χρειαστούν στον μαθηματικό φορμαλισμό που αφορά την Κβατομηχανική.

Έστω $\mathcal{H}$ ένας χώρος *Hilbert* και A ένας γραμμικός τελεστής με πεδίο ορισμού $D(A) \subset \mathcal{H}$.

Ορισμός 1.3.1. *Αν $\overline{D(A)} = \mathcal{H}$, τότε το πεδίο ορισμού $D(A^*)$ του συζυγούς τελεστή αποτελείται από $\phi \in \mathcal{H}$ έτσι ώστε να υπάρχει $n \in \mathcal{H}$ με*

$$(A\psi, \phi) = (A^*\phi, n)$$

για κάθε $\psi \in D(A)$ και ο τελεστής A^* ορίζεται ως

$$A^*\phi = n$$

Ορισμός 1.3.2. *Ο A θα λέγεται κλειστός, αν το γράφημα του αποτελεί κλειστό υποσύνολο του $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$.*

Ορισμός 1.3.3. *Το κανονικό σύνολο ενός κλειστού τελεστή A, με $\overline{D(A)} = \mathcal{H}$ ορίζεται ως εξής:*

$$\rho(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} : A - \lambda I \text{ αποτελεί αμφιμονοσήμαντη απεικόνιση} \\ \text{, με φραγμένο αντίστροφο}\}$$

Για $\lambda \in \rho(A)$, ο φραγμένος τελεστής $R_\lambda = (A - \lambda I)^{-1}$ καλείται ο επιλύον τελεστής του A στο λ.
Το $\rho(A) \subset \mathbb{C}$ είναι ανοικτό σύνολο και το συμπλήρωμα του $\sigma(A)$ καλείται ***φάσμα του A****. Το σύνολο $\sigma_\rho A \subset \sigma(A)$ που περιέχει τις ιδιοτιμές του A πεπερασμένης πολλαπλότητας καλείται σημειακό φάσμα του A.*

Ορισμός 1.3.4. *Ένας τελεστής A θα λέγεται ερμιτιανός, εάν $A = A^*$. Επίσης, θα είναι ερμιτιανός αν και μόνο αν είναι συμμετρικός και $D(A) = D(A^*)$. Μια βασική ιδιότητα των ερμιτιανών τελεστών είναι ότι έχουν πραγματικό φάσμα, δηλαδή*

$$\sigma_\rho A \subset \sigma(A) \subset \mathbb{R}$$

Πρόταση 1.3.1. *Αν ο A είναι συμμετρικός με $D(A) = \mathcal{H}$, τότε θα είναι φραγμένος και ερμιτιανός.*

Ορισμός 1.3.5. *Ο A θα λέγεται θετικός, εάν ισχύει*

$$(A\phi, \phi) \geq 0, \;\; \forall \phi \in D(A)$$

Πρόταση 1.3.2. *Ένας φραγμένος θετικός τελεστής είναι ερμιτιανός.*

Ορισμός 1.3.6. *Ένας γραμμικός και φραγμένος τελεστής θα λέγεται συμπαγής, αν απεικονίζει φραγμένα σύνολα σε pre-compact σύνολα, δηλαδή σύνολα που έχουν συμπαγή κλειστότητα. Με $l(\mathcal{H})$ θα συμβολίζουμε τον χώρο των συμπαγών τελεστών του $\mathcal{H}$.*

Ορισμός 1.3.7. *Ένας τελεστής θα λέγεται* ***τελεστής ίχνους*** *(trace class), εάν $A \in l(\mathcal{H})$ με*

$$\|A\|_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n(A) < +\infty$$

όπου $\mu_n(A) = \sqrt{\lambda_n(A)}$ και $\lambda_n(A)$ ιδιοτιμές του A^*A.

Πρόταση 1.3.3. *Ενας A αποτελεί τελεστή ίχνους αν και μόνο αν*

$$\sum_{n=1}^{\infty}(Ae_n, e_n) < \infty \;\; \forall \{e_n\}_{n=1}^{\infty} \text{ ορθοκανονική βάση του } \mathcal{H}$$

Ορίζουμε τότε

$$Tr(A) = \sum_{n=1}^{\infty}(Ae_n, e_n)$$

Προφανώς, για να έχει νόημα ένας τέτοιος ορισμός, θα πρέπει η ποσότητα αυτή να είναι ανεξάρτητη από την επιλογή της ορθοκανονικής βάσης $\{e_n\}_{n=1}^{\infty}$.

Πρόταση 1.3.4. *Αν υπάρχει ορθοκανονική βάση $\{e_n\}_{n=1}^{\infty}$ τέτοια ώστε*

$$\sum_{n=1}^{\infty}(Ae_n, e_n) < \infty$$

και ο A είναι ένας θετικός γραμμικός τελεστής, τότε ο A είναι τελεστής ίχνους.

Ορισμός 1.3.8. *Ένας γραμμικός και φραγμένος τελεστής A θα λέγεται Hilbert-Schmidt τελεστής, εάν A^*A είναι τελεστής ίχνους. Ισοδύναμα, θα είναι Hilbert-Schmidt τελεστής αν και μόνο αν για κάποια επιλογή ορθοκανονικής βάσης $\{e_n\}_{n=1}^{\infty}$, έχουμε ότι*

$$\sum_{n=1}^{\infty} \|Ae_n\|^2 < \infty$$

Ο διανυσματικός χώρος των τελεστών Hilbert-Schmidt θα συμβολίζεται με $l_2(\mathcal{H})$ και αποτελεί χώρο Hilbert, εφοδιασμένος με το εξής εσωτερικό γινόμενο

$$(A, B)_2 = TrAB^*$$

Ορισμός 1.3.9. *Ένας τελεστής T θα καλείται essentially-self adjoint , εάν είναι συμμετρικός, έχει πυκνό πεδίο ορισμου και έχει μοναδική επέκταση στον χώρο $\mathcal{H}$ που είναι ερμιτιανός τελεστής.*

Κεφάλαιο 2

Κίνηση Brown

2.1 Ορισμός

Η κίνηση *Brown* είναι μία πολύ βασική στοχαστική ανέλιξη η οποία έχει καλές ιδιότητες όπως θα δούμε αργότερα και θα την χρησιμοποιήσουμε για να ορίσουμε το στοχαστικό ολοκλήρωμα στα επόμενα κεφάλαια. Για αυτό το λόγο θα αναφερθούμε στις βασικές τις ιδιότητες.

Ορισμός 2.1.1. *Μια στοχαστική ανέλιξη $\{B(t)\}_{t\geq 0}$ ορισμένη σε έναν χώρο πιθανότητας $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ και με τιμές στο $\mathbb{R}$ λέγεται (μονοδιάστατη) κίνηση Brown αν ισχύουν τα εξής:*
α) Η ανέλιξη έχει ανεξάρτητες προσαυξήσεις. Δηλαδή, $\forall n \in \mathbb{N}$ και $0 < t_1 < t_2 < .... < t_n$, οι τυχαίες μεταβλητές

$$B(t_1), B(t_2) - B(t_1), ..., B(t_n) - B(t_n - 1)$$

είναι ανεξάρτητες.

β) $\forall\ 0 \leq s < t, \quad B(t) - B(s) \sim \mathcal{N}(0, t-s)$.

γ) Με πιθανότητα 1, η συνάρτηση $t \to B(t)$ είναι συνεχής. Δηλαδή κάθε μονοπάτι της κίνησης Brown ειναι σχεδόν βεβαίως συνεχές.

Μια κίνηση *Brown* για την οποία ισχύει $B(0) = x$ με πιθανότητα 1, λέγεται κίνηση *Brown* με σημείο εκκίνησης το x, ενώ όταν $x = 0$ θα λέγεται τυπική κίνηση *Brown*.

Εστω B τυπική κίνηση *Brown* και X μια τυχαία μεταβλητή που να ορίζεται στον ίδιο χώρο πιθανότητας, ανεξάρτητη της B και με κατανομή μ. Τότε η ανέλιξη W που ορίζεται ως εξής :

$$W(t) = X + B(t), \ \ \forall t \geq 0$$

είναι κίνηση *Brown* με αρχική κατανομή μ.

2.2 Ιδιότητες

Ιδιότητα 2.2.1. *Έστω $x \in \mathbb{R}$ και B μια κίνηση Brown με $B(0) = x$. Τότε, $Cov(B(s), B(t)) = s \wedge t, \ \forall s, t \geq 0$.*

Απόδειξη :

$$\begin{aligned} Cov(B(s), B(t)) &= Cov(B(s), B(t) - B(s) + B(s)) \\ &= Cov(B(s), B(t) - B(s)) + Cov(B(s), B(s)) \\ &= 0 + Var(B(s)) = s \end{aligned}$$

(Έχουμε χρησιμοποιήσει την διγραμμικότητα για την συνδιακύμανση, την ιδιότητα ανεξαρτήτων προσαυξήσεων της κίνησης *Brown* και ότι $B(s) \sim \mathcal{N}(x, s)$)

Ιδιότητα 2.2.2. *Η κίνηση Brown υπάρχει ως στοχαστική ανέλιξη, δήλαδή υπάρχει στοχαστική ανέλιξη $\{B(t)\}_{t \geq 0}$ που να ικανοποιεί τις ιδιότητες του ορισμού.*

Η απόδειξη (*Paul Levy*) γίνεται κατασκευαστικά και στη συνέχεια αποδεικνύονται οι ιδιότητες του ορισμου 2.1.1. Για την απόδειξη κατά *Paul Levy* βλ. Δ. Χελιώτης, Εισαγωγή στον Στοχαστικό Λογισμό, Παραρτημα Γ.

Ιδιότητα 2.2.3. ***(Μοναδικότητα)***
Εάν η $B(t)$ αποτελεί μια τυπική κίνηση Brown, τότε και η $-B(t)$ αποτελεί μια τυπική κίνηση Brown. Επομένως, δεν έχουμε μοναδικότητα με αυτή την έννοια. Όμως, έχουμε μοναδικότητα με την έννοια της κατανομής.
Δηλαδή : Εάν B, B^* αποτελούν τυπικές κινήσεις Brown, τότε θα έχουν την ίδια κατανομή.
(Το αποτέλεσμα αυτό προκύπτει επειδή οι B, B^* έχουν τις ίδιες κατανομές πεπερασμένης διάστασης.)

Ιδιότητα 2.2.4. *Μια κίνηση Brown επάγει με φυσιολογικό τρόπο στον αντίστοιχο χώρο πιθανότητας μια διήθηση. Την $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$ με :*

$$F_t = \sigma(\{B(s) : s \in [0, t]\})$$

Γενικά τις διηθήσεις τις αντιλαμβανόμαστε ως την πληροφορία μέχρι την χρονική στιγμή t.

Ιδιότητα 2.2.5. ***(Μετατόπιση)***
Εστω B κίνηση Brown και $t_0 \geq 0$. Ορίζουμε την ανέλιξη X ως

$$X(t) = B(t_0 + t) - B(t_0) \ \forall t \in [0, \infty)$$

Τότε,
(α) Η X είναι τυπική κίνηση Brown.
(β) Η X είναι ανεξάρτητη από την F_{t_0} .

Ιδιότητα 2.2.6. ***(Αλλαγή Κλίμακας)***
Εστω B τυπική κίνηση Brown και $c \neq 0$. Ορίζουμε την ανέλιξη X ως

$$X(t) = \tfrac{1}{c}B(c^2 t) \ \forall t \in [0, \infty).$$

Τότε η X αποτελεί τυπική κίνηση Brown.

Ιδιότητα 2.2.7. ***(Αντιστροφή χρόνου)***
Εστω B τυπική κίνηση Brown. Ορίζουμε την ανέλιξη X ως εξής:

$$X(t) = \begin{cases} tB(\frac{1}{t}), & \forall t > 0 \\ 0, \ t = 0 \end{cases}$$

Τότε η X αποτελεί τυπική κίνηση Brown.
Μια συνέπεια της είναι ότι η X είναι συνεχής στο 0 σχεδόν βεβαίως και άρα το

$$lim_{t \to \infty} \frac{B(t)}{t} = 0, \text{ σχεδόν βεβαίως.}$$

Η κίνηση *Brown* έχει όμως και πιο περίεργες ιδιότητες. Τα μονοπάτια της, ενω είναι συνεχή σχεδόν βεβαίως, δεν είναι διαφορίσιμα πουθενά, σχεδόν βεβαίως. Επιπλέον, εαν ξεκινάει από το 0, δεν διατηρεί πρόσημο.
Ορίζουμε

$$T^- = inf\{t > 0 : B(t) < 0\}$$
$$T^+ = inf\{t > 0 : B(t) > 0\}$$
$$T^0 = inf\{t > 0 : B(t) = 0\}$$

Ιδιότητα 2.2.8. $T^- = T^+ = T^0 = 0$

Ιδιότητα 2.2.9. ***(Ισχυρή Μαρκοβιανή Ιδιότητα)***
Μια από τις σημαντικότερες ιδιότητες της κίνησης Brown είναι ότι έχει την ισχυρή μαρκοβιανή ιδιότητα. Δηλαδή, για κάθε χρόνο διακοπής T, η συμπεριφορά κάθε μονοπατιού της κίνησης Brown μετά τον χρόνο διακοπής T επηρεάζεται μόνο από την τιμή της $B(T)$.

Εστω $(B(t))_{t\geq 0}$ μια κίνηση *Brown* ορισμένη σε έναν χώρο πιθανότητας $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ και $(\mathcal{F}_t)_{t\geq 0}$ η διήθηση που επάγεται φυσιολογικά από αυτήν. Έχουμε δει ότι για $t_0 \geq 0$ η $(X(t) = B(t_0+t)-B(t_0))_{t\in[0,\infty)}$ αποτελεί μια τυπική κίνηση *Brown* και επίσης ανεξάρτητη από την $\mathcal{F}_{t_0}$. Το γεγονός ότι η κίνηση *Brown* έχει την ισχυρή μαρκοβιανή ιδιότητα ουσιαστικά μας λέει ότι ο χρόνος t_0 μπορεί να είναι ένας οποιοσδήποτε χρόνος διακοπής T, σχεδόν βεβαίως πεπερασμένος. Θεωρούμε την σ-άλγεβρα :

$$\mathcal{F}_T = \{A \in \mathcal{F} : A \cap \{T \leq t\} \in \mathcal{F}_t \ \ \forall t \geq 0\}$$

η οποία αντιστοιχεί στην πληροφορία μέχρι τον (τυχαίο) χρόνο διακοπής T. Το βασικό θέωρημα που χρειαζόμαστε είναι το ακόλουθο:

Θεώρημα 2.2.1. ***(Ισχυρή Μαρκοβιανή ιδιότητα)*** *Εστω B μια κίνηση Brown και T χρόνος διακοπής, σχεδόν βεβαίως πεπερασμένος. Τότε η ανέλιξη $(B(T+t)-B(T))_{t\geq 0}$ είναι κίνηση Brown ανεξάρτητη από τη σ-άλγεβρα $\mathcal{F}_T$.*

Βασική συνέπεια :
Επειδή τώρα μπορούμε να γράψουμε την εξής σχέση :

$$B(t) = B(T) + B(t) - B(T),$$

παρατηρούμε ότι η κίνηση *Brown* εξαρτάται από την τιμή $B(T)$ και από την $(B(t) - B(T)) : t \geq T)$, που είναι ανεξαρτητη απο την σ-άλγεβρα $\mathcal{F}_T$.

Κεφάλαιο 3

Ολοκλήρωμα *Itô*

3.1 Κατασκευή:

Ερώτημα:
Μπορούμε να βρούμε μια λογική μαθηματική αναπαράσταση για τον θόρυβο σε προβλήματα του τύπου ;

$$\frac{dN}{dt} = (r(t) + \text{ θόρυβος})N(t)$$

ή γενικότερα σε προβλήματα της μορφής

$$\frac{dX}{dt} = b(t, x_t) + \text{θόρυβος } \sigma(t, x_t)$$

όπου b, σ δοθείσες συναρτήσεις ;
Θα μελετήσουμε αρχικά το μονοδιάστατο πρόβλημα. Το λογικό θα ήταν η εύρεση μιας W_t που να αναπαριστά το θόρυβο, τέτοια ώστε :

$$\frac{dX}{dt} = b(t, x_t) + \sigma(t, x_t).W_t$$

Οι ιδιότητες που αναμένει κάποιος να έχει η $\{W_t\}$, από προβλήματα που συναντούμε στις διάφορες επιστήμες είναι οι ακόλουθες:
(α) Για $t_1 \neq t_2$ W_{t_1}, W_{t_2} ανεξάρτητες.
(β) $\{W_t\}$ στατική, δηλαδή η από κοινού κατανομή της $\{W_{t_1+t}, \ldots, W_{t_k+t}\}$ είναι ανεξάρτητη του χρόνου t.
(γ) $E(W_t) = 0, \ \forall t$

Το πρόβλημα είναι ότι δεν υπάρχει κάποια "λογική" ανέλιξη που να ικανοποιά τα (α) και (β), διότι μια τέτοια ανέλιξη $\{W_t\}$ δεν έχει συνεχείς τροχιές. Επίσης, αν απαιτήσουμε $E[W_t^2] = 1$, τότε η συνάρτηση $(t, w) \to W_t(w)$ δεν είναι μετρήσιμη ως προς την σ- άλγεβρα $\mathcal{B}x\mathcal{F}$, όπου $\mathcal{B}$ η *Borel* σ- άλγεβρα στο $[0, \infty)$. Παρ᾽ όλα αυτά, είναι δυνατό να αναπαραστήσουμε την $\{W_t\}$ ως μια

γενικευμένη στοχαστική ανέλιξη, που λέγεται ανέλιξη λευκού θορύβου.
Στη δική μας περίπτωση, θα προτιμούσαμε να ξαναγράψουμε την εξίσωση στην διακριτή της μορφή, δηλαδή:

Έστω $0 = t_0 < t_1 < \ldots\ldots. < t_m = t$,

$$X_{k+1} - X_k = b(t_k, x_k)\Delta t_k + \sigma(t_k, x_k).W_k \Delta_{t_k}$$

όπου χρησιμοποιούμε συμβολισμό:

$$X_j = X(t_j), \;\; W_k = W_{t_k}, \;\; \Delta t_k = t_{k-1} - t_k$$

Επίσης, θα ορίσουμε $\Delta V_k = W_k \Delta_{t_k}, \;\; \Delta V_k = V_{t_{k+1}} - V_{t_k}$,
όπου $\{V_k\}_{t\geq 0}$ κατάλληλη σ.α. Οι απαιτήσεις που είχαμε για την $\{W_t\}$ μεταφέρονται στην V_t, δηλαδή θα έχει και αυτή στατικές, ανεξάρτητες προσαυξήσεις με μέση τιμή 0.

Προκύπτει ότι η μόνη τέτοια σ.α. με συνεχείς τροχιές είναι η γνωστή σε μας κίνηση *Brown* $\{B_t\}$ (*Knight* 1981). Άρα θέτουμε $V_t = B_t$ και παίρνουμε:

$$X_k = X_o + \sum_{j=0}^{k-1} b(t_j, x_j)\Delta t_j + \sum_{j=0}^{k-1} \sigma(t_j, x_j)\Delta B_j \tag{3.1}$$

Το ερώτημα είναι το εξής: Υπάρχει το όριο αυτού, όταν $\Delta t_j \to 0$;
Εάν ναι, τότε χρησιμοποιώντας κάποιας μορφής «ολοκλήρωμα», θα πάρουμε ένα αποτέλεσμα της μορφής:

$$X_t = X_0 + \int_0^t b(s, X_s)ds + \int_0^t s(s, X_s)dB_s \tag{3.2}$$

και ως σύμβαση, η $X_t = X_t(\omega)$ θα είναι μια σ.α. που "ικανοποιεί" την εξίσωση αυτή. Αυτό που απομένει είναι να κατασκευάσουμε ενα ολοκλήρωμα της μορφής

$$\int_0^t f(s, \omega)dB_s, \tag{3.3}$$

όπου $B_t(\omega)$ τυπική κίνηση *Brown* για μια ευρεία, εαν είναι εφικτό, κλάση συναρτήσεων $f : [0, \infty) \times \Omega \to \mathbb{R}$

Ορισμός του ολοκληρώματος :

Η διαδικασία που θα ακολουθήσουμε έχει τρία βήματα:
(α) Θα ορίσουμε το ολοκήρωμα $\int X_s dB_s$, για απλές διαδικασίες X_s.
(β) Κάθε "λογική" διαδικασία θα μπορούμε να την προσεγγίσουμε με από απλές

διαδικασίες.
(γ) Τα ολοκληρώματα των προσεγγίσεων θα συγκλίνουν σε κάποιο όριο, ανεξάρτητα από την ακολουθία που έχουμε χρησιμοποιήσει.

Ορισμός 3.1.1. *Έστω* $X_s = \sum_{i=1}^{k} c_i \mathcal{X}_{(t_i,t_{i+1}]}(s)$.

Ορίζουμε :

$$I(X) = \int X_s dB_s = \sum_{i=1}^{k} c_i (B_{t_i+1} - B_{t_i}), \tag{3.4}$$

όπου c_i *είναι τυχαίες μεταβλητές,* $\mathcal{F}_{t_i}-$ *μετρήσιμες.*
Παρατηρούμε ότι η $\{X_s\}_{s\geq 0}$ *είναι προσαρμοσμένη, δηλαδή η* X_s *είναι* $\mathcal{F}_s$ *μετρήσιμη,* $\forall s \geq 0$.

Ορισμός 3.1.2.

$$\mathcal{H}_0^2 = \{\{X_s\}_{s\geq 0} : \quad X_s = \sum_{i=0}^{N-1} c_i(\omega)\mathcal{X}_{(t_i,t_{i+1}]}(s) \ \text{με } 0 \leq t_0 < t_1 < \ldots\ldots < t_N < +\infty$$
$$\text{και } c_i(\omega) \text{ να είναι } \mathcal{F}_{t_i} \text{ μετρήσιμη τυχαία μεταβλητή} \} \tag{3.5}$$

(Απαιτήσαμε μετρησιμότητα των τυχαίων μεταβλητών στο αριστερό άκρο του διαστήματος. Υπάρχουν και άλλα ολοκληρώματα, παρόμοια με αυτο του *Itô*, που απαιτούν μετρησιμότητα σε άλλα σημεία.)

Ορισμός 3.1.3.

$$\mathcal{H}^2 = \{\{X_s\}_{s\geq 0} \text{ προσαρμοσμένες διαδικασίες με } E(\int_0^\infty X_s(\omega)^2 ds) < \infty\} \tag{3.6}$$

Παρατηρούμε ότι $\mathcal{H}^2 \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{P}\times m)$, όπου m το μέτρο *Lebesgue* στο $[0,\infty)$.

Επίσης έχουμε την νόρμα :

$$\|X\|^2 = \int_0^\infty \int_\Omega X_s(\omega)^2 d\mathbb{P} ds \tag{3.7}$$

Λήμμα 3.1.1. *Ο* $\mathcal{H}_0^2$ *είναι πυκνός στον* $\mathcal{H}^2$*, ως προς την νόρμα αυτή.*

Πρόταση 3.1.1. *Αν* $X, Y \in \mathcal{H}_0^2$*, τότε :*
(α) $I(aX + bY) = aI(X) + bI(Y)$ *(γραμμικότητα)*
(β) $E[(I(X))^2] = \|X\|^2$ *(Ισομετρία Itô)*
(γ) $E[I(X)] = 0$

Απόδειξη :
(α) Εύκολα, γράφοντας την $aX + bY$ ως άθροισμα χαρακτηριστικών πάνω στις τομές των αντίστοιχων συνόλων των X, Y.
(β)

$$\begin{aligned}E[(I(X))^2] &= E[\sum_{i=0}^{N-1} c_i(B_{t_i+1} - B_{t_i}) \sum_{j=0}^{N-1} c_j(B_{t_j+1} - B_{t_j})] \\ &= E[\sum_{i=0}^{N-1} c_i^2(B_{t_i+1} - B_{t_i})^2] \\ &+ 2E[\sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=i+1}^{N-1} c_i c_j (B_{t_{i+1}} - B_{t_i})(B_{t_{j+1}} - B_{t_j})]\end{aligned}$$

Επειδή οι c_i είναι $\mathcal{F}_{t_i}$ μετρήσιμες και οι $B_{t_i+1} - B_{t_i}$ είναι ανεξάρτητες ως προς $\mathcal{F}_{t_i}$, το πρώτο μελος γράφεται ως εξής:

$$\begin{aligned}E[\sum_{i=0}^{N-1} c_i^2(B_{t_i+1} - B_{t_i})^2] &= \sum_{i=0}^{N-1} E[c_i^2(B_{t_i+1} - B_{t_i})^2] \\ &= \sum_{i=0}^{N-1} E[c_i^2]E[(B_{t_{i+1}} - B_{t_i})^2] \\ &= \sum_{i=0}^{N-1} E[c_i^2](t_{i+1} - t_i) \\ &= \|X\|^2\end{aligned}$$

Για τους ιδιους λόγους μπορούμε να σπασουμε και το δεύτερο μελος σε γινόμενα μέσων τιμών. Επειδή όμως εμφανίζεται η $E[B_{t_j+1} - B_{t_j}] = 0$, ο δεύτερος όρος θα μηδενιστεί.

(γ)

$$\begin{aligned}E[I(X)] &= \sum_{i=0}^{N-1} E[c_i(B_{t_i+1} - B_{t_i})] \\ &= \sum_{i=0}^{N-1} E[c_i]E[(B_{t_i+1} - B_{t_i})] = 0\end{aligned}$$

Ορισμος του ολοκληρώματος στον χώρο $\mathcal{H}^2$

Έστω $X \in \mathcal{H}^2$. Επιλέγουμε μια ακολουθία $\{X_n\} \subset \mathcal{H}_0^2$, ώστε $\|X - X_n\| \to 0$.

Τότε, $E[(I(X_n) - I(X_m))^2] = E[(I(X_n - X_m))^2] = \|X_n - X_m\|^2 \to 0$.

Επομένως, η $I(X_n)$ είναι *Cauchy* ακολουθία στον χώρο $\mathcal{L}^2(\mathbb{P})$ και άρα, αφού πρόκειται για χώρο *Hilbert*, θα συγκλίνει κάπου στον $\mathcal{L}^2(\mathbb{P})$.

Εξαρταται όμως το όριο αυτο από την επιλογη της ακολουθίας $\{X_n\}$;

Έστω $Y_n \to X, \;\; I(Y_n) \to M$ και $I(X_n) \to L$. Τότε έχουμε :

$E[(L-M)^2] = lim\ E[(I(X_n) - I(Y_n))^2] \leq \|X_n - X_m\|^2 \to 0,$
επομένως οι συναρτησεις L, M ταυτίζονται με την $\mathcal{L}^2$ έννοια.

Ορίζουμε $I(X) = L$ **(Ολοκλήρωμα** *Itô*)

Παραδειγμα 3.1.1. *Έστω* $X_s = B_s \mathcal{X}_{(0,t]}(s)$.
Τότε,

$$\begin{aligned}
\|X_s\|^2 &= E[\int_0^\infty X_s^2 ds] \\
&= E[\int_0^t B_s^2 ds] \\
&= \int_0^t E[B_s^2] ds \\
&= \int_0^t s ds = \frac{t^2}{2} < +\infty
\end{aligned}$$

Ορίζουμε $X_n = \sum_{i=0}^{N-1} B_{t_i} \mathcal{X}_{(t_i, t_{i+1})}(s) \quad \in \mathcal{H}_0^2$

$$\begin{aligned}
\|X - X_n\|^2 &= E[\int_0^t (X(s) - X_n(s))^2 ds] \\
&= E[\sum_{i=0}^{N-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} (B_s - B_{t_i})^2 ds] \\
&= \sum_{i=0}^{N-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} E[(B_s - B_{t_i})^2] ds \\
&= \sum_{i=0}^{N-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} (s - t_i) ds \\
&= \sum_{i=0}^{N-1} \frac{(t_{i+1} - t_i)^2}{2} \leq \frac{t\,\|\Delta\|}{2} \to 0
\end{aligned}$$

οπου με $\|\Delta\|$ *συμβολίζουμε το πλάτος της διαμέρισης. Άρα, η ακολουθία που ορίσαμε συγκλίνει στην* X.

Που συγκλίνει όμως το $I(X_n) = \sum_{i=0}^{N-1} B_{t_i}(B_{t_{i+1}} - B_{t_i})$;
Ορίζουμε $I^*(X) = \sum_{i=0}^{N-1} B_{t_i+1}(B_{t_{i+1}} - B_{t_i})$

$I(X_n) + I^*(X_n) = \sum_{i=0}^{N-1} B_{t_{i+1}}^2 - B_{t_i}^2 = B_t^2$

$I(X_n) - I^*(X_n) = \sum_{i=0}^{N-1} (B_{t_{i+1}} - B_{t_i})^2 \ \to t \quad$ *($\mathcal{L}^2$ σύγκλιση)*

Άρα,

$$I(X_n) = \frac{I^* + I - (I^* - I)}{2} \ \to \frac{B_t^2 - t}{2} \tag{3.8}$$

και επομένως αυτό είναι το ολοκλήρωμα Itô της B_s*, δηλαδή :*

$$\int X_s dB_s = \int B_s \mathcal{X}_{[0,t]}(s) ds = \int_0^t B_s dB_s = \frac{B_t^2 - t}{2} \tag{3.9}$$

Η εμφάνιση του όρου $-t$ *μας παραξενεύει, διότι στην περίπτωση του ολοκληρώματος Riemann δεν έχουμε κάτι αντίστοιχο.*

3.2 Ιδιότητες ολοκληρώματος *Itô*

Πρόταση 3.2.1. *Ισχύει η πρόταση* 3.1.1 *για τις ιδιότητες και στην περίπτωση του χώρου* $\mathcal{H}^2$ *:*
(α) $I(aX + bY) = aI(X) + bI(Y)$ *(γραμμικότητα)*
(β) $E[(I(X))^2] = \|X\|^2$ *(Ισομετρία Itô)*
(γ) $E[I(X)] = 0$

Απόδειξη :
(α) Θεωρούμε δύο ακολουθίες $\{X_n\},\ \{Y_n\} \subset \mathcal{H}_0^2$, τέτοιες ώστε $\|X_n - X\| \to 0$ και $\|Y_n - Y\| \to 0$.
Έχουμε $I(aX_n + bY_n) = aI(X_n) + bI(Y_n)$

$$\begin{aligned} \|aX_n + bY_n - (aX + bY)\| &= \|a(X_n - X) + b(Y_n - Y)\| \\ &\leq |a| \, \|X_n - X\| + |b| \, \|Y_n - Y\| \to 0 \end{aligned}$$

Άρα, $I(aX + bY) = lim\ I(aX_n + bY_n) = lim\ aI(X_n) + bI(Y_n) = aI(X) + bI(Y)$
(γ)

$$\begin{aligned} &E[|I(X) - I(X_n)|] \leq E[(I(X) - I(X_n))^2]^{\frac{1}{2}} \to 0 \\ &E[I(X)] = E[I(X) - I(X_n)] + E[I(X_n)] = E[I(X) - I(X_n)] \\ &|E[I(X) - E(X_n)]| \leq E[|I(X) - I(X_n)|] \to 0 \end{aligned}$$

(β) Ισομετρία *Itô* :
Αν $X_n \to X \in \mathcal{L}^2(\mathbb{P})$, τότε $E[X_n^2] \to E[X^2]$, διότι
$|\,\|X_n\|^2_{\mathcal{L}^2} - \|X\|^2_{\mathcal{L}^2}\,| \leq \|X_n - X\|^2_{\mathcal{L}^2}$

Άρα, εάν επιλέξουμε ακολουθία $\{X_n\} \subset \mathcal{H}^2_0$ με $\|X_n - X\| \to 0$, τότε : $E[I(X_n)^2] = \|X_n\|^2 \to \|X\|^2$
Μπορούμε να γράψουμε : $E[I(X)^2] = E[I^2(X) - I^2(X_n)] + E[I(X_n)^2]$
Επειδή $I(X_n) \to I(X)$, τότε $I^2(X_n) \to I^2(X)$.
Αφού η σύγκλιση είναι στον $\mathcal{L}^2$, θα έχουμε από το πιο πάνω αποτέλεσμα ότι:
$E[I^2(X) - I^2(X_n)] \to 0$ και άρα $E[I(X)^2] = \|X\|^2$

Ορισμός ολοκληρωμάτων του τύπου : $\int_a^b X_s dB_s$

Εάν $X \in \mathcal{H}^2$, τότε $X \cdot \mathcal{X}_{(a,b]} \in \mathcal{H}^2$ και επομένως μπορούμε να τα ορίσουμε ως εξής:

$$\int_a^b X_s dB_s = I(X \cdot \mathcal{X}_{(a,b]}) \tag{3.10}$$

Πρόταση 3.2.2. *Η $\int_a^b X_s dB_s$ είναι $\mathcal{F}_b$ μετρήσιμη τ.μ, διότι :*

$$\int_a^b X_s dB_s = lim\ I(X_n(s) \cdot \mathcal{X}_{(a,b]}(s))$$
$$X_n(s) \cdot \mathcal{X}_{(a,b]}(s) = \sum c_i(\omega) \cdot \mathcal{X}_{(t_i,t_{i+1}]}(s)$$

που είναι $\mathcal{F}_b$ μετρήσιμη, άρα και η $\int_a^b X_s dB_s$ είναι $\mathcal{F}_b$ μετρήσιμη σχεδόν βεβαίως.

Πρόταση 3.2.3. *(a)$E[\int_a^b X_s dB_s\,|\mathcal{F}_a] = 0$*
(β)$E[(\int_a^b X_s dB_s)^2|\mathcal{F}_a] = E[\int_a^b X_s^2 dB_s|\mathcal{F}_a]$

Απόδειξη: Γίνεται όπως και στις προηγούμενες προτάσεις, με προσέγγιση από απλές διαδικασίες.
(α)Αν X απλή διαδικασία, δηλαδή $X \in \mathcal{H}^2_0$, τότε

$\int_a^b X_s dB_s = I(X \cdot \mathcal{X}_{(a,b]})$ και $X \cdot \mathcal{X}_{(a,b]} = \sum_{i=0}^{N-1} c_i(\omega)\mathcal{X}_{(t_i,t_{i+1}]}$, όπου $t_0 = a$ και $t_N = b$.

$I(X \cdot \mathcal{X}_{(a,b]}) = \sum_{i=0}^{N-1} c_i(\omega)(B_{t_{i+1}} - B_{t_i})$

Άρα, $E[c_i(B_{t_{i+1}} - B_{t_i})|\mathcal{F}_a] = E[E[c_i(B_{t_{i+1}} - B_{t_i})|\mathcal{F}_{t_i}]|\mathcal{F}_a] = 0$,διότι $\mathcal{F}_a \subset \mathcal{F}_{t_i}$

και οι προσαυξήσεις $(B_{t_{i+1}} - B_{t_i})$ ανεξάρτητες της $\mathcal{F}_{t_i}$.
Αυτό που μένει να δείξουμε είναι ότι αν $X \in \mathcal{H}^2$ και $X_n \in \mathcal{H}^2$
με $\|X_n - X\|_{\mathcal{L}^2} \to 0$, οι ιδιότητες διατηρούνται μέσω της οριακής διαδικασίας.

$$\begin{aligned}|E[\int_a^b X_n dB_s - \int_a^b X_s dB_s|\mathcal{F}_a]| &= |E[I(X_n) - I(X)|\mathcal{F}_a]| \\ &\leq E[|I(X_n) - I(X)||\mathcal{F}_a] \\ &\leq E[(I(X_n) - I(X))^2|\mathcal{F}_a] \to 0\end{aligned}$$

(β) Παρομοίως με το (α).

Το στοχαστικό ολοκλήρωμα ως στοχαστική ανέλιξη.
Για κάθε $t \geq 0$, ορίσαμε το $\int_0^t X_s dB_s$ ως ένα $\mathcal{L}^2$ όριο κάποιων τυχαίων μεταβλητών.
Αν τώρα θέλουμε να το δούμε και ως μια στοχαστική ανέλιξη, θα μπορούσαμε να ορίσουμε $\{(X \cdot B)_t\}_{t \geq 0} = \int_0^t X_s dB_s$
Για κάθε $t \geq 0$, μπορούμε να επιλέξουμε αντιπροσώπους αυτής,

$$(X \cdot B)_t^{(1)}, (X \cdot B)_t^{(2)}$$

Για κάθε $t \geq 0$, ισχύει η $\mathbb{P}[(X \cdot B)_t^{(1)} = (X \cdot B)_t^{(2)}] = 1$.
Όμως στην γενική περίπτωση δεν ισχύει μια ισότητα της μορφής :

$$\mathbb{P}[(X \cdot B)_t^{(1)} = (X \cdot B)_t^{(2)}, \forall t \geq 0] = 1 \tag{3.11}$$

Αν θέσουμε $C_t = \{X \cdot B)_t^{(1)} \neq (X \cdot B)_t^{(2)}\}$,
τότε $\mathbb{P}(C_t) = 0, \forall t \geq 0$.

Η εξίσωση 3.11 παίρνει την μορφή :

$$\mathbb{P}[(\bigcup_{t \geq 0} C_t)^c] \neq 1, \ \ \text{στην γενική περίπτωση} \tag{3.12}$$

Εάν όμως είχαμε την επιπλέον πληροφορία ότι η οι αντιπρόσωποι
$(X \cdot B)_t^{(1)}, (X \cdot B)_t^{(2)}$ είναι δεξιά συνεχείς, τότε θα μπορούσαμε μέσω απλών επιχειρημάτων να ισχυριστούμε ότι η ισότητα ισχύει για τους ρητούς και άρα, λόγω δεξιάς συνέχειας, ισχύει $\forall t \geq 0$.

Θεώρημα 3.2.1. *Έστω $X \in \mathcal{H}^2$. Μπορούμε για κάθε $t \geq 0$ να επιλέξουμε ένα αντιπρόσωπο της $(X \cdot B)_t$, ώστε η στοχαστική ανέλιξη $\{(X \cdot B)_t\}_{t \geq 0}$ να είναι ένα συνεχές και τετραγωνικά ολοκληρώσιμο $Martingale$.*

Απόδειξη:
Το κρίσιμο σημείο της απόδειξης αυτής είναι η χρήση του ακόλουθου θεωρήματος:

Θεώρημα 3.2.2. *Ανισότητα Doob*

$$\text{Αν } (X_t)_{t\geq 0} \text{ submartingale, τότε}$$

$$\mathbb{P}[\sup_{t\in(0,T]} |X_t| \geq l] \leq \frac{1}{l^2} E[|X_T|^2] \tag{3.13}$$

Επιλέγουμε $X \in \mathcal{H}^2$ και $\{X_n\} \subset \mathcal{H}_0^2$, έτσι ώστε $\|X_n - X\|_{\mathcal{L}^2} \to 0$.
Τότε έχουμε ότι : $(X \cdot B)_t = lim\ (X_n \cdot B)_t$ και $(X_n \cdot B)_t$ είναι ένα συνεχές $Martingale$.
Επίσης, από ανισότητα $Jensen$, η $(X_n \cdot B)_t^2$ είναι ένα συνεχές $Martingale$.

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}[\sup_{0\leq t\leq T} |(X_n \cdot B)_t - (X_m \cdot B)_t)| \geq l] &= \mathbb{P}[\sup_{0\leq t\leq T} |(X_n - X_m \cdot B)_t| \geq l] \\
&\leq \frac{1}{l^2} E[((X_n - X_m) \cdot B)_T^2] \\
&= \frac{1}{l^2} E[\int_0^T (X_n - X_m)^2 ds] \text{ (Ισομετρία } It\hat{o})
\end{aligned}$$

Δηλαδή η ακολουθία $\{X_n\}$ είναι $Cauchy$ στον $\mathcal{L}^2(\mathbb{P} \times m)$ και άρα μπορούμε $\forall k \in \mathbb{N}$ να βρούμε $n_0(k) : n, m \geq n_0 \implies E[\int_0^T |X_n - X_m|^2 dt] < \frac{1}{16^k}$.
Για $n \geq n_0$, θέτουμε :

$$A_k = \sup_{0\leq t\leq T} \{|(X_{n+1} \cdot B)_t - (X_n \cdot B)_t|\} \geq \frac{1}{2^k}$$

$$\text{Τότε, } \mathbb{P}[A_k] \leq 2^{2k} \tfrac{1}{2^{4k}} = \tfrac{1}{2^{2k}}.$$

Άρα, $\sum_{k=1}^{\infty} \mathbb{P}(A_k) < \infty$.
Εφαρμόζουμε το λήμμα $Borel - Cantelli$ και παίρνουμε ότι $\mathbb{P}[limsupA_k] = 0$.
Άρα, σε κάποιο σύνολο $\Omega_1 \subset \Omega$ με $\mathbb{P}(\Omega_1) = 1, \exists k_0(\omega) : k \geq k_0$ έχουμε:

$$\sup_{0\leq t\leq T} \left\{|(X_{n_{k+1}} \cdot B)_t - (X_{n_k} \cdot B)_t|\right\} < \frac{1}{2^{2k}}$$

$$\sup_{0\leq t\leq T} \left\{\left\|(X_{n_{k+1}} \cdot B)_t - (X_{n_k} \cdot B)_t\right\|_{\mathcal{L}^\infty[0,T]}\right\} < \frac{1}{2^{2k}}$$

$$
\begin{aligned}
\left\|X_{n_{k+l}} - X_{n_k}\right\|_\infty &\leq \sum_{j=k}^{k+l} \left\|X_{n_{j+1}} - X_{n_j}\right\|_\infty \\
&= \sum_{j=k}^{k+l} \frac{1}{2^{2j}} \\
&\leq \frac{1}{2^{2k}} \cdot 2 < \infty
\end{aligned}
$$

Επομένως η ακολουθία $\{X_{n_k}\}_k$ είναι $Cauchy$ στον χώρο $(C[0,T], \|\cdot\|_\infty)$ ο οποίος είναι πλήρης, άρα θα συγκλίνει σε μία συνεχή στο $[0,T]$ συνάρτηση $M_t(\omega)$ για ω $\in \Omega_1$.

Άρα, αν

$$
M_t = \begin{cases} lim\ (X_{n_k} \cdot B)_t, \omega \in \Omega_1 \\ 0, \omega \notin \Omega_1 \end{cases}
$$

θα έχουμε $\mathbb{P}[M_t = (X \cdot B)_t] = 1$. Δηλαδή μπορούμε να επιλέξουμε για κάθε $T > 0$ έναν αντιπρόσωπο της ανέλιξης $(X \cdot B)_t$, έτσι ώστε η $\{(X \cdot B)_t\}_{t \geq 0}$ να είναι συνεχής στο $[0,T]$.
Θέλουμε να δείξουμε ότι η $(X \cdot B)_t$ είναι $Martingale$:

$$
E[(X \cdot B)_t | \mathcal{F}_s] = (X \cdot B)_s \iff \int_{A \in \mathcal{F}_s} (X \cdot B)_t \, d\mathbb{P} = \int_{A \in \mathcal{F}_s} (X \cdot B)_s \, d\mathbb{P}
$$

Για απλές ισχύει αφού : $\int_{A \in \mathcal{F}_s} (X_n \cdot B)_t \, d\mathbb{P} = \int_{A \in \mathcal{F}_s} (X_n \cdot B)_s \, d\mathbb{P}$

και επειδή :

$$
|\int_{A \in \mathcal{F}_s} (X_n \cdot B)_t - (X \cdot B)_t \, d\mathbb{P}| \leq (\int_{A \in \mathcal{F}_s} ((X_n \cdot B)_t - (X \cdot B)_t)^2 \, d\mathbb{P})^{\frac{1}{2}} \to 0
$$

$$
\implies \int_{A \in \mathcal{F}_s} (X \cdot B)_t \, d\mathbb{P} = \int_{A \in \mathcal{F}_s} (X \cdot B)_s \, d\mathbb{P} \tag{3.14}
$$

Έχουμε ορίσει το ολοκλήρωμα $Itô$ στον χώρο $\mathcal{H}^2$, όμως θα θέλαμε να το ορίσουμε και σε έναν μεγαλύτερο χώρο (Να χαλαρώσουμε δηλαδή τις υποθέσεις για την υπό ολοκλήρωση στοχαστική διαδικασία)

Ορισμός 3.2.1.

$$
\mathcal{H}^2_{loc} = \{X\, \textit{προσαρμοσμένη διαδικασία, με}\ \mathbb{P}[\int_0^t X_s^2 dt < \infty] = 1,\ \forall t \geq 0\} \tag{3.15}
$$

Ορισμός 3.2.2. *Μια ακολουθία χρόνων διακοπής* $\{\tau_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ *θα λέμε ότι είναι τοπικοποιούσα, εάν :*
(α) $(\tau_n)_{n\in\mathbb{N}} \nearrow$
(β) $\tau_n(\omega) \leq n \ \forall \omega \in \Omega$
(γ) $\lim_n \tau_n(\omega) = \infty$

Θεώρημα 3.2.3. *Αν* $X \in \mathcal{H}^2_{loc}$*, τότε υπάρχει μια τοπικοποιούσα ακολουθία* $(\tau_n)_{n\in\mathbb{N}}$*, τέτοια ώστε :*

$$X_t^{(n)}(\omega) = X_t(\omega) \cdot \mathcal{X}\{\omega : t \leq \tau_n(\omega)\} \in \mathcal{H}^2 \text{ για κάθε } n \in \mathbb{N}$$

Επομένως, με την χρήση αυτού του θεωρήματος, μπορούμε να ορίσουμε το ολοκλήρωμα για κάθε $X \in \mathcal{H}^2_{loc}$

Απόδειξη : Ορίζουμε $\tau_n = n \wedge \sigma_n(\omega)$, όπου: $\sigma_n(\omega) = inf\{t \geq 0 : \int_0^t X_s^2(\omega)ds \geq n\}$

(α) η τ_n είναι αύξουσα (προφανές)
(β) $\tau_n(\omega) \leq n \ \forall \omega \in \Omega$ (προφανές)
(γ) $lim_n \tau_n(\omega) = \infty$

Άρα, τ_n είναι τοπικοποιούσα. Θα δείξουμε ότι η $\{X_t^{(n)}\}_{t\geq 0} \in \mathcal{H}^2$ είναι μετρήσιμη, προσαρμοσμένη και ότι $E[\int_0^t X_t^2(\omega)dt] < \infty$.
Αρκεί να δείξουμε ότι : $\{\omega : t \leq \tau_n(\omega)\} \in \mathcal{F}_t \ \forall t \geq 0$.
Έχουμε ότι : $\{t \leq \tau_n(\omega)\} = \{t > \tau_n(\omega)\}^c$
$\{t > \tau_n(\omega)\} = \bigcup_{k\in\mathbb{N}}\{t - \frac{1}{k} \geq \tau_n(\omega)\}$
Όμως, $\{t - \frac{1}{k} \geq \tau_n(\omega)\} \in \mathcal{F}_{t-\frac{1}{k}} \subset \mathcal{F}_t$.
Επομένως, $\{\omega : t \leq \tau_n(\omega)\} \in \mathcal{F}_t \ \forall t \geq 0$

$$\begin{aligned} E[\int_0^\infty (X_t^{(n)})^2(\omega)dt] &= E[\int_0^\infty X_t^2(\omega)\mathcal{X}\{\omega : t \leq \tau_n(\omega)\}dt] \\ &= E[\int_0^{\tau_n} X_t^2(\omega)dt] \\ &= lim_k \ E[\int_0^{t_k^{(n)}} X_t^2(\omega)dt] \leq n \end{aligned}$$

όπου $t_k^{(n)} \nearrow \tau_n(\omega)$.

Λήμμα 3.2.1. *Αν ο* T *είναι χρόνος διακοπής, τότε :*

$$\int_0^{t+T} X_s dB_s = \int_0^t X_s(\omega) \cdot \mathcal{X}_{[0,T(\omega)]}(s)dB_s, \tag{3.16}$$

$\forall t \geq 0$*, σχεδόν βεβαίως και για* $X \in \mathcal{H}^2$

Ιδέα Απόδειξης :

(α) Το δείχνουμε για $X \in \mathcal{H}_o^2$ και με T να παίρνει πεπερασμένες τιμές.

(β)

$$T_n = \begin{cases} \frac{[2^n T]+1}{2^n}, & T(\omega) \leq n \text{και} X \in \mathcal{H}_0^2 \\ n, & T(\omega) > n \end{cases}$$

Έχουμε $T_n(\omega) \to T(\omega) \ \ \forall \omega \in \Omega$.

(γ) Παίρνουμε $\mathcal{L}^2$ όριο στην ολοκληρωτική σχέση και το δείχνουμε γενικά για $X \in \mathcal{H}^2$

3.3 Φόρμουλα του *Itô*

Στο ολοκλήρωμα *Riemann* έχουμε το γνωστό αποτέλεσμα (Θεμελιώδες Θεώρημα Ολοκλήρωσης) για μια παραγωγίσιμη συνάρτηση $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

$$f(b) - f(a) = \int_a^b f^{'}(x) \tag{3.17}$$

και μια γενίκευση αυτού όταν $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ έχει συνεχή παράγωγο :

$$f(g(b)) - f(g(a)) = \int_a^b f^{'}(g(x)) \tag{3.18}$$

Θα θέλαμε μια αντίστοιχη σχέση και στην περίπτωση που έχουμε ολοκληρώματα *Itô*, όπου όπως έχουμε αναφέρει η κίνηση *Brown* ως προς την οποία ολοκληρώνουμε δεν είναι διαφορίσιμη.

Θεώρημα 3.3.1. *(Τύπος Itô Μορφη (1).)*
Έστω $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}, \ f \in C^2(\mathbb{R})$. Τότε έχουμε με πιθανότητα 1 ότι :

$$f(B_t) = f(B_0) + \int_0^t f^{'}(B_s) dB_s + \frac{1}{2} \int_0^t f^{''}(B_s) ds \ \forall t \geq 0 \tag{3.19}$$

Μια γενίκευση αυτού του αποτελέσματος είναι το επόμενο θεώρημα:

Θεώρημα 3.3.2. *(Τύπος Itô. Μορφή (2).)*
Έστω $f \in C^{2,1}(\mathbb{R} \times [0, \infty))$. Τότε με πιθανότητα 1 ισχύει ότι :

$$f(B_t, t) - f(B_0, 0) =$$

$$\int_0^t \frac{\partial f}{\partial s}(B_s,s)ds + \int_0^t \frac{\partial f}{\partial x}(B_s,s)dB_s + \frac{1}{2}\int_0^t \frac{\partial f}{\partial x^2}(B_s,s)ds \ \ \forall t>0. \tag{3.20}$$

Μια γενίκευση σε περισσότερες διαστάσεις είναι η ακόλουθη :

Θεώρημα 3.3.3. *(Τύπος Itô. Μορφή (3).)*
Έστω $f \in C^{2,1}(R^d \times [0,\infty))$ και $B = (B^{(1)}, B^{(2)}, ..., B^{(d)})$ μια d-διάστατη κίνηση Brown. Τότε με πιθανότητα 1, ισχύει ότι :

$$f(B_t,t) - f(B_0,0) =$$

$$\int_0^t \frac{\partial f}{\partial s}(B_s,s)ds + \int_0^t \nabla f(B_s,s)dB_s + \int_0^t \frac{1}{2}\triangle f(B_s,s)ds \ \ \forall t>0 \tag{3.21}$$

Παρατήρηση 3.3.1. *Η συμβολική και πιο εύχρηστη μορφη του τύπου Itô είναι η ακόλουθη:*

$$df(B_s,s) = \frac{\partial f}{\partial s}(B_s,s)ds + \nabla f(B_s,s)dB_s + \frac{1}{2}\triangle f(B_s,s)ds \tag{3.22}$$

Παρατήρηση 3.3.2. *Εάν μια $f \in C^{2,1}(\mathbb{R}^d \times [0,\infty))$ ικανοποιεί την :*

$$\frac{\partial f}{\partial t}(x,t) + \frac{1}{2}\triangle f(x,t) = 0,$$

τότε η ανέλιξη $M_t = f(B_t,t)$ αποτελεί local martingale, διότι προκύπτει ότι:

$$df(B_s,s) = \frac{\partial f}{\partial s}(B_s,s)ds + \nabla f(B_s,s)dB_s + \frac{1}{2}\triangle f(B_s,s)ds = \nabla f(B_s,s)dB_s$$

Ορισμός 3.3.1. *Έστω $\{X_t\}_{t\geq 0}$, $X : [0,\infty)\times\Omega \to \mathbb{R}^d$ στοχαστική διαδικασία στον χώρο $(\Omega,\mathcal{F},\mathbb{P})$. Θα λέμε ότι είναι μια διαδικασία Itô, εάν :*

$$X_t = X_0 + \int_0^t u(s,w)ds + \int_0^t v(s,w)dB_s \tag{3.23}$$

,όπου η $u(s,w), v(s,w) \in \mathcal{H}^2_{loc}$ $(\mathbb{P}[\int_0^t v(s,w)ds < \infty \ \forall t \geq 0] = 1)$ και $X_0\mathcal{F}_0$ προσαρμοσμένη.

Μια συμβολική (διαφορική) μορφη αυτής της έκφρασης είναι η εξής :

$$dX_t = udt + vdB_t \tag{3.24}$$

Το πρώτο από τα ολοκληρώματα στον παραπάνω ορισμό καλείται τμήμα τάσης της στοχαστικής ανέλιξης, ενώ το δεύτερο τμήμα διάχυσης. Πιο αναλυτικά στον παρακάτω πίνακα φαίνονται και οι σχέσεις που ικανοποιούνται :

$$\begin{bmatrix} dX_t^{(1)} \\ ... \\ dX_t^{(d)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u^{(1)}(t,\omega) \\ ... \\ u^{(d)}(t,\omega) \end{bmatrix} \cdot dt + \begin{bmatrix} v_{1,1}(t,\omega) & ... & v_{1,m}(t,\omega) \\ ... & ... & ... \\ v_{d,1}(t,\omega) & ... & v_{d,m}(t,\omega) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} dB_t^{(1)} \\ ... \\ dB_t^{(m)} \end{bmatrix}$$

Θεώρημα 3.3.4. *(Τύπος Itô. Μορφή (4).)*
Εστω $f \in C^2(\mathbb{R}^d)$ και X μια d-διάστατη ανέλιξη Itô. Τότε με πιθανότητα 1 ισχύει ότι :

$$f(X_t) = f(X_0) + \int_0^t \nabla f(X_s, s) dX_s + \frac{1}{2}\int_0^t \sum_{i,j=1}^{d} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(X_s) dX_s^{(i)} dX_s^{(j)} \quad \forall t > 0. \tag{3.25}$$

Οι αποδείξεις των θεωρημάτων αυτών είναι τεχνικές και παραλείπονται. (βλ. Δ. Χελιώτης, Εισαγωγή στον Στοχαστικό Λογισμό, Παραρτημα Γ.)
Τι είναι όμως ακριβώς το γινόμενο $dX_s^{(i)} dX_s^{(j)}$; Αυτό που κάνουμε είναι να χρησιμοποιήσουμε τις εκφράσεις που μας δίνει ο πιο πάνω πίνακας και έτσι προκύπτει ένας "κανόνας" πολλαπλασιασμού διαφορικών :

$dt \cdot dt = 0$
$dB_t^{(i)} \cdot dt = 0, \quad$ για κάθε $i \in \{1, ..., m\}$
$dB_t^{(i)} \cdot dB_t^{(i)} = dt, \quad$ για κάθε $i \in \{1, ..., m\}$
$dB_t^{(i)} \cdot dB_t^{(j)} = 0, \quad$ για κάθε $i, j \in \{1, ..., m\}$ με $i \neq j$

Επομένως, το δεύτερο ολοκλήρωμα είναι *Riemann* και όχι *Itô*, όπως προκύπτει από τον πιο πάνω κανόνα.

Πρόταση 3.3.1. *Εστω $(X_t)_{t\geq 0}$, $(Y_t)_{t\geq 0}$ δυό μονοδιάστατες ανελίξεις Itô. Τότε ισχύει :*

$$d(X_t \cdot Y_t) = Y_t dX_t + X_t dY_t + dX_t dY_t \tag{3.26}$$

ενώ σε ολοκληρωτική (αυστηρή) μορφή έχουμε ισοδύναμα:

$$X_t Y_t - X_0 Y_0 = \int_0^t Y_s dX_s + \int_0^t X_s dY_s + \int_0^t dX_s dY_s, \tag{3.27}$$

Δηλαδή, τα πρώτα δύο ολοκληρώματα είναι ως προς ανελίξεις Itô, ενώ το τρίτο είναι Riemann. Η σημαντική συνέπεια αυτού του τύπου είναι ότι το γινόμενο $X_t \cdot Y_t$ είναι και αυτό μια ανέλιξη Itô.

Απόδειξη :
Η ανέλιξη $Z_t = \begin{pmatrix} X_t \\ Y_t \end{pmatrix}$ είναι ανέλιξη *Itô* όπως θα δούμε σε λίγο. Εφαρμόζουμε τον τύπο του *Itô* για την συνάρτηση $f(x, y) = xy$ και παίρνουμε :

$$d(X_t Y_t) = df(Z_t) = Y_t dX_t + X_t dY_t + \frac{1}{2}(dX_t dY_t + dY_t dX_t)$$

Μένει να δούμε ότι η Z_t είναι πράγματι ανέλιξη *Itô*. Από την υπόθεση, έχουμε ότι:

$$\begin{aligned} dX_t &= u(t,\omega)dt + v(t,\omega)dB_t \\ dY_t &= u^*(t,w)dt + v^*(t,w)dB_t \end{aligned}$$

Συνδυάζοντας αυτές τις δύο, μπορούμε να γράψουμε την παρακάτω σχέση:

$$dZ_t = \begin{pmatrix} u(t,w) \\ u^*(t,w) \end{pmatrix} \cdot dt + \begin{pmatrix} v(t,w) \\ v^*(t,w) \end{pmatrix} \cdot dB_t.$$

και παίρνουμε το ζητούμενο αποτέλεσμα.

Κεφάλαιο 4

Στοχαστικές Διαφορικές Εξισώσεις

4.1 Χαρακτηρισμός λύσεων

Εάν εισάγουμε έναν όρο που εκφράζει τυχαιότητα σε συνήθης ή και μερικές διαφορικές εξισώσεις, τότε παίρνουμε μια Στοχαστική Διαφορική Εξίσωση.
Οι εξισώσεις με τις οποίες θα ασχοληθούμε θα είναι της μορφής:

$$\begin{aligned} dX_t &= b(t, X_t)dt + \sigma(t, X_t)dB_t \\ X_0 &= x \end{aligned} \tag{4.1}$$

Όπου $b : [0, T] \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n, \quad \sigma : [0, T] \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{n \times m}, \quad X_0 \in \mathbb{R}^n$

Ως λύση μιας τέτοιας ΣΔΕ θα θέλαμε μια στοχαστική διαδικασία $\{X_t\}_{t \geq 0}$ που να έχει συνεχείς τροχιές, να είναι $\mathcal{F}_t$ - προσαρμοσμένη, να ικανοποιούνται οι συνθήκες ολοκληρωσιμότητας :

$$\int_0^t |b(s, X_s)| \, ds < \infty, \int_0^t \left|\sigma^2(s, X_s)\right| ds < \infty, \ \forall t \geq 0$$

και να είναι :

$$X_t = X_0 + \int_0^t b(s, X_s)ds + \int_0^t \sigma(s, X_s)dB_s, \ \forall t \geq 0$$

Όπως και στην περίπτωση των ντετερμινιστικών διαφορικών εξισώσεων, μας ενδιαφέρει πολύ το ζήτημα της ύπαρξης και μοναδικότητας λύσης αλλά και το είδος της λύσης (ισχυρές και ασθενείς λύσεις).
Έστω η εξίσωση 4.1 την οποία συμβολίζουμε με $E(b, \sigma)$. Εάν είναι $\mathcal{F}_t$ - προσαρμοσμένη και ικανοποιούνται οι συνθήκες ολοκληρωσιμότητας, τότε μια λύση

της θα συμβολίζεται με $(\Omega, \mathcal{F}, (\mathcal{F}_t), \mathbb{P}, \mathcal{B}, X)$. Αν ισχύει επιπλέον ότι $X_0 = x$, τότε θα είναι λύση της $E_x(b, \sigma)$.
Θα ακολουθήσουν λοιπόν κάποιοι ορισμοί για την κατηγοροποίηση των λύσεων:

Ορισμός 4.1.1. *Θα λέμε ότι υπάρχει ασθενής λύση για την $E(b, \sigma)$, εάν η εξίσωση $E_x(b, \sigma)$ έχει μια τουλάχιστον λύση, $\forall x \in \mathbb{R}^n$.*

Ορισμός 4.1.2. *Θα λέμε ότι έχουμε μοναδική ασθενή λύση, εαν οποιεσδήποτε δύο λύσεις της $E_x(b, \sigma)$ έχουν την ίδια κατανομή.*

Ορισμός 4.1.3. *Θα λέμε ότι υπάρχει ισχυρή λύση για την $E(b, \sigma)$, όταν ικανοποιούνται οι συνθήκες ολοκληρωσιμότητας και επιπλέον είναι $\mathcal{F}_t$ - προσαρμοσμένη.*

Ορισμός 4.1.4. *Θα λέμε ότι η $E(b, \sigma)$ έχει ισχυρά μοναδική λύση X, όταν για οποιαδήποτε άλλη λύση X^* με $X_0 = X_0^*$ σχεδόν βεβαίως, οι X, X^* είναι μη διακρινόμενες.*
(Δηλαδή $\mathbb{P}[X_t = X_t^*, \ \ \forall t \geq 0] = 1$)

Παρατήρηση 4.1.1. *Η μετάβαση από ασθενή σε ισχυρή λύση γίνεται με την επιπλέον υπόθεση ότι η λύση μας είναι $\mathcal{F}_t$ - προσαρμοσμένη.*

Θα ακολουθήσει ένα θεώρημα που μας εξασφαλίζει μοναδικότητα στη λύση:

Θεώρημα 4.1.1. *Έστω $T > 0$ και ότι ικανοποιούνται συνθήκες Lipschitz για τις συναρτήσεις b, σ. Δηλαδή, $\exists k > 0$:*

$$
\begin{aligned}
|b(t,x) - b(t,y)| + |\sigma(t,x) - \sigma(t,y)| &\leq k\,|x - y| \\
|b(t,x)| + |\sigma(t,x)| &\leq k(1 + |x|), \ \forall x, y \in \mathbb{R}, \ \forall t \in [0, T]
\end{aligned}
$$

Τότε υπάρχει λύση στο διάστημα $[0, T]$ και οποιεσδήποτε δύο λύσεις είναι μη διακρινόμενες.

(Η απόδειξη στηρίζεται στην Ισομετρία *Itô* και την ιδιότητα *Lipschitz*, βλ. *Oksendal*5.2)

Παρατήρηση 4.1.2. *Όπως και στις ντετερμινιστικές διαφορικές εξισώσεις, χρειαζόμαστε οι συναρτησεις που εμπλέκονται να εχουν Lipschitz ομαλότητα, αλλιώς δεν μπορούμε να εξασφαλίσουμε μοναδικότητα στη λύση.*

Πόρισμα 4.1.1. *Ισχύουν τα ίδια με προηγουμένως και στην περίπτωση όπου $t \in [0, \infty)$. Δηλαδή, αν οι συνθήκες ικανοποιούνται για $t \in [0, \infty)$ και $x, y \in \mathbb{R}$, τότε υπάρχει λύση και οποιεσδήποτε δύο λύσεις είναι μη διακρινόμενες, για $t \in [0, \infty)$.*

Λήμμα 4.1.1. *Εάν b, σ ικανοποιούν τις υποθέσεις του θεωρήματος 4.1.1, τότε κάθε λύση της στοχαστικής διαφορικής εξίσωσης (ισχυρή η ασθενής) θα είναι ασθενώς μοναδική.*

Θα ακολουθήσουν δύο παραδείγματα για να κατανοήσουμε την σημασία των υποθέσεων του προηγούμενου θεωρήματος.

Παραδειγμα 4.1.1. *Ας θεωρήσουμε την εξίσωση αρχικών τιμών :*

$$\frac{dX_t}{dt} = X_t^2$$
$$X_0 = 1$$

Εδώ έχουμε ότι $b(x) = x^2$ και $\sigma(x) = 0$ και για $0 \leq t < 1$ έχουμε την $X_t = \frac{1}{1-t}$ ως την μοναδική λύση. Παρατηρούμε όμως ότι οι συνθήκες του θεωρήματος δεν ικανοποιούνται $\forall t \geq 0$ και είναι αδύνατο να βρεθεί λύση $\forall t \geq 0$.
Γενικότερα, αν οι συνθήκες του θεωρήματος ικανοποιούνται, τότε εξασφαλίζουμε ότι η λύση δεν θα παρουσιάζει εκρήξεις (δηλαδή $lim_{t \to t_0} |X_t(\omega)| = \infty$).

Παραδειγμα 4.1.2. *Ας θεωρήσουμε τώρα την εξίσωση αρχικών τιμών*

$$\frac{dX_t}{dt} = 3X_t^{\frac{2}{3}}$$
$$X_0 = 0$$

Η συγκεκριμένη έχει περισσότερες από μια λύσεις (δηλαδή δεν έχουμε μοναδικότητα). Παρατηρούμε ότι $\forall a > 0$, η $X_t = \begin{cases} 0, & t \leq a \\ (t-a)^3, & t > a \end{cases}$ την επιλύει

4.2 Διαχύσεις *Itô*

Ας θεωρήσουμε το εξής πρόβλημα στη μηχανική:
Θα θέλαμε να περιγράψουμε την κίνηση ενός μικρού σωματιδίου μέσα σε ένα ρευστό, το οποίο να υπόκειται σε τυχαίους μοριακούς βομβαρδισμούς. Εάν θεωρήσουμε ότι υπάρχει ένα $b(t, x) \in \mathbb{R}^3$ που μας περιγράφει το πεδίο ταχύτητας του ρευστού μας, τότε ένα μαθηματικό μοντέλο που θα μπορούσε να μας περιγράψει την τυχαία, όπως αναμένουμε, θέση X_t του σωματιδίου, θα μπορούσε να είναι το ακόλουθο:

$$\frac{dX_t}{dt} = b(t, X_t) + \sigma(t, X_t) \cdot W_t, \tag{4.2}$$

όπου η W_t μας περιγράφει κάποιου είδους λευκό θόρυβο και $\sigma(t, X_t) \in \mathbb{R}^{3\times 3}$

Ορισμός 4.2.1. *Θεωρούμε την εξίσωση :*

$$dX_t = b(t, X_t)dt + \sigma(t, X_t) \cdot dB_t, \tag{4.3}$$

όπου $X_t \in \mathbb{R}^n,\ b(t, X_t) \in \mathbb{R}^n,\ \sigma(t, X_t) \in \mathbb{R}^{n\times m}$ *και* B_t *η* m *- διάστατη κίνηση Brown. Η λύση μιας τέτοιας στοχαστικής διαφορικής εξίσωσης θα καλείται* ***διάχυση*** *Itô και περιγράφει το φυσικό πρόβλημα που έχουμε διατυπώσει.*

Ορισμός 4.2.2. *Μια χρονικά ομογενής διάχυση Itô είναι μια στοχαστική ανέλιξη* $X_t(\omega) = X(t, \omega) : [0, \infty) \times \Omega \to \mathbb{R}^n$ *που ικανοποιεί μια στοχαστική διαφορική εξίσωση της μορφής*

$$dX_t = b(X_t) + \sigma(X_t)dB_t,$$

όπου $t \geq s,\ X_s = x,\ B_t\ m-$ *διάστατη κίνηση Brown,*
$b : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n, \sigma : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{n\times m}$ *συναρτήσεις που ικανοποιούν την εξής σχέση Lipschitz:*

$$|b(x) - b(y)| + |\sigma(x) - \sigma(y)| \leq D\,|x - y| \quad x, y \in \mathbb{R}^n,\ |\sigma|^2 = \sum |\sigma_{ij}|^2$$

Η λύση αυτη είναι μοναδική σύμφωνα με το θεώρημα 4.1.1 και θα την συμβολίσουμε με $X_t^{s,x}$ $t \geq s$ *και εάν* $s = 0$, *συμβολίζουμε* $X_t^x = X_t^{0,x}$.

Παρατήρηση 4.2.1.

$$\begin{aligned} X_{s+h}^{s,x} &= x + \int_s^{s+h} b(X_u^{s,x})du + \int_s^{s+h} \sigma(X_u^{s,x})dB_u \\ &= x + \int_0^h b(X_{s+v}^{s,x})dv + \int_0^h \sigma(X_{s+v}^{s,x})dB_v^* \\ \text{Επίσης έχουμε } X_h^{0,x} &= x + \int_0^h b(X_v^{0,x})dv + \int_0^h \sigma(X_v^{0,x})dB_v, \end{aligned}$$

όπου $u = s + v$ *και* $B_v^* = B_{s+v} - B_s$.
Αφού η λύση είναι ασθενώς μοναδική σύμφωνα με το λήμμα 4.1.1, οποιεσδήποτε δύο λύσεις της θα πρέπει να έχουν τις ίδιες κατανομές.
Αρα, επειδή B_v, B_v^* *έχουν τις ίδιες κατανομές, από ασθενή μοναδικότητα της λυσης θα έχουμε ότι* $\{X_{s+h}^{s,x}\}_{h\geq 0}$ *και* $\{X_h^{0,x}\}_{h\geq 0}$ *έχουν τις ίδιες κατανομές. Δηλαδή, η λύση της στοχαστικής διαφορικής εξίσωσης είναι χρονικά ομογενής.*

Θεώρημα 4.2.1. *Μαρκοβιανή Ιδιότητα χρονικά ομογενών διαχύσεων Itô*
Έστω $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *μια φραγμένη συνάρτηση Borel. Τότε για* $t, h \geq 0$ *έχουμε ότι :*

$$E^x[f(X_{t+h})|\mathcal{F}_t](\omega) = E^{X_t(\omega)}[f(X_h)], \tag{4.4}$$

όπου με E^x *συμβολίζουμε την δεσμευμένη μέση τιμή ως προς την* $\{X_t\}_{t\geq 0},\ X_0 = x$.
(Δηλαδή, $E^y[f(X_h)] = E[f(X_h^y)]$*)*

Απόδειξη :
Για $r \geq t$, έχουμε ότι :

$$X_r(\omega) = X_t(\omega) + \int_r^t b(X_u)du + \int_r^t \sigma(X_u)dB_u$$

Από μοναδικότητα της λύσης θα έχουμε επίσης : $X_r(\omega) = X_r^{t,X_t}(\omega)$.

Με άλλα λόγια, εάν ορίσουμε $F(x,t,r,\omega) = X_r^{t,x}(\omega)$, για $r \geq t$ θα είχαμε $X_r(\omega) = F(X_t,t,r,\omega)$, $r \geq t$ και επίσης η τυχαία μεταβλήτη

$$\omega \to F(x,t,r,\omega) \text{ είναι ανεξάρτητη από τη διήθηση } \mathcal{F}_t.$$

Χρησιμοποιώντας την συνάρτηση F, μπορούμε να ξαναγράψουμε το θεώρημα σε μια άλλη μορφη :

$$E[f(F(X_t,t,t+h,\omega))|\mathcal{F}_t] = E[f(F(x,0,h,\omega))]_{x=X_t}$$

Ορίζουμε $g(x,\omega) = f(F(X_t,t,t+h,\omega))$. Η g είναι μετρήσιμη και μπορούμε να την προσεγγίσουμε από μια αύξουσα ακολουθία απλών. Κάνοντας χρήση των ιδιότητων της δεσμευμένης μέσης τιμής και του γεγονότος ότι η διάχυση *Itô* $(X_t)_{t\geq 0}$ είναι χρονικά ομογενής, προκύπτει το ζητούμενο αποτέλεσμα.

Παρατήρηση 4.2.2. *Το θεώρημα αυτό μας δίνει ένα σημαντικό αποτέλεσμα, ότι κάθε διάχυση Itô $(X_t)_{t\geq 0}$ είναι μαρκοβιανή ανέλιξη ως προς την διήθηση $\{\mathcal{F}\}_{t\geq 0}$.*

Το επόμενο θεώρημα μας λέει ότι αν ακόμα αντικαταστήσουμε τον χρόνο t με κάποιο χρόνο διακοπής τ, θα ισχύει μια ανάλογη σχέση όπως στο προηγούμενο θεώρημα. (*Δηλαδή, μια διάχυση Itô έχει την ισχυρή μαρκοβιανή ιδιότητα.*)

Θεώρημα 4.2.2. *Έστω $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ μια φραγμένη συνάρτηση Borel, τ χρόνος διακοπής ως προς την διήθηση $\mathcal{F}_t$ με $\tau < +\infty$ σχεδόν βεβαίως. Τότε, $\forall h \geq 0$ έχουμε ότι :*

$$E^x[f(X_{\tau+h})|\mathcal{F}_t] = E^{X_\tau}[f(X_h)] \tag{4.5}$$

Απόδειξη : Παρόμοια τεχνική με την προηγούμενη απόδειξη
(βλ. *Oksendal*(2003) Θεώρημα 7.2.4)

4.3 Γεννήτορας μιας διάχυσης *Itô*

Σε πάρα πολλές εφαρμογές είναι σημαντικό να μπορούμε να συσχετίσουμε εναν διαφορικό τελεστη δεύτερης τάξης A με μια διάχυση *Itô* X_t. Η σύνδεση που θα έχουν αυτά τα δύο θα είναι ότι ο A θα αποτελεί τον γεννήτορα της ανέλιξης X_t.

Ορισμός 4.3.1. *Έστω $(X_t)_{t\geq 0}$ μια (χρονικά ομογενής) διάχυση Itô που ορίζεται στον $\mathbb{R}^n$. Ο γεννήτορας A της $(X_t)_{t\geq 0}$ ορίζεται ως εξής:*

$$Af(x) = \lim_{t \downarrow 0} \frac{E^x[f(X_t)] - f(x)}{t}\ , x \in \mathbb{R}^n \tag{4.6}$$

Το σύνολο των συναρτήσεων για τις οποίες υπάρχει το όριο αυτό, στο σημείο $x \in \mathbb{R}^n$, θα ορίζεται ως $\mathcal{D}_A(x)$, ενώ με $\mathcal{D}_A$ θα συμβολίζουμε το σύνολο των συναρτήσεων για τις οποίες το όριο αυτό υπάρχει $\forall x \in \mathbb{R}^n$.

Λήμμα 4.3.1. *Έστω $Y_t = Y_t^x$ μια ανέλιξη Itô στον $\mathbb{R}^n$ που να έχει την πιο κάτω μορφή :*

$$Y_t^x(\omega) = x + \int_0^t u(s,\omega)ds + \int_0^t v(s,\omega)dB_s(\omega) \tag{4.7}$$

όπου B είναι m-διάστατη κίνηση Brown. Έστω επίσης ότι $f \in C_0^2(\mathbb{R}^n)$, τ χρόνος διακοπής ως προς την διήθηση $\{\mathcal{F}_t^{(m)}\}$ για τον οποίο γνωρίζουμε ότι $E^x[\tau] < \infty$. Επιπλέον, υποθέτουμε ότι $u(t,\omega)$ και $v(t,\omega)$ είναι φραγμένες στο σύνολο που παίρνουν τιμές τα (t,ω) έτσι ώστε η $Y(t,\omega)$ να παίρνει τιμές στον φορέα της f . Τότε έχουμε ότι :

$$E^x[f(Y_\tau)] = \\ f(x) + E^x\left[\int_0^\tau \left(\sum_i u_i(s,\omega)\frac{\partial f}{\partial x_i}(Y_s) + \frac{1}{2}\sum_{i,j}(v\cdot v^T)_{i,j}(s,\omega)\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(Y_s)\right)ds\right] \tag{4.8}$$

Απόδειξη : Θέτουμε $Z = f(Y_\tau)$ και εφαρμόζουμε τον τύπο του *Itô*. (Μορφή (3)) .Παίρνουμε ότι :

$$\begin{aligned} dZ &= \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(Y)dY_i + \frac{1}{2}\sum_{i,j}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(Y)dY_i dY_j \\ &= \sum_i u_i \frac{\partial f}{\partial x_i}dt + \frac{1}{2}\sum_{i,j}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(vdB)_i(vdB)_j + \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(vdB)_i \end{aligned}$$

Επιπλεόν,

$$
\begin{aligned}
(vdB)_i(vdB)_j &= \left(\sum_k v_{ik}dB_k\right)\left(\sum_n v_jndB_n\right) \\
&= \sum_k (v_{ik}v_{jk})\, dt = (v\cdot v^T)_{ij}dt
\end{aligned}
$$

και συνδυάζοντας τις δύο αυτές σχέσεις παίρνουμε:

$$
\begin{aligned}
f(Y_t) = f(Y_0) + \int_0^t &\left(\sum_i u_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{1}{2}\sum_{i,j}(v\cdot v^T)_{ij}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}\right) ds \\
&+ \sum_{i,k}\int_0^t v_{ik}\frac{\partial f}{\partial x_i} dB_k
\end{aligned}
$$

Επομένως,

$$
E^x[f(Y_\tau)] = f(x) + E^x\left[\int_0^\tau \left(\sum_i u_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(Y_s) + \frac{1}{2}\sum_{i,j}(v\cdot v^T)_{i,j}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(Y_s)\right) ds\right] \tag{4.9}
$$

$$
+ \sum_{i,j} E^x[v_{ik}\frac{\partial f}{\partial x_i}(Y)dB_k] \tag{4.10}
$$

Μένει τώρα να δείξουμε ότι ο τελευταίος όρος στην τελευταία σχέση είναι ίσος με 0. Αν η συνάρτηση g είναι μια φραγμένη συνάρτηση $Borel$, δηλαδή υπάρχει $M > 0$ έτσι ώστε $|g| \le M$, τότε για κάθε $k \in \mathbb{N}$ θα έχουμε :

$$
E^x\left[\int_0^{\tau\wedge k} g(Y_s)dB_s\right] = E^x\left[\int_0^k \mathcal{X}_{\{s<\tau\}} g(Y_s)dB_s\right] = 0,
$$

διότι οι συναρτήσεις $g(Y_s)$ και $\mathcal{X}_{\{s<\tau\}}$ είναι $\mathcal{F}_t^{(m)}$ προσαρμοσμένες. Επίσης,

$$
\begin{aligned}
E^x\left[\left(\int_0^\tau g(Y_s)dB_s - \int_0^{\tau\wedge k} g(Y_s)dB_s\right)^2\right] &= E^x\left[\int_{\tau\wedge k}^\tau g^2(Y_s)ds\right] \\
&\le M^2E^x[\tau - \tau\wedge k] \to 0
\end{aligned}
$$

Άρα,

$$
0 = \lim_{k\to\infty} E^x\left[\int_0^{\tau\wedge k} g(Y_s)dB_s\right] = E^x\left[\int_0^\tau g(Y_s)dB_s\right]
$$

Συνδυάζοντας με το προηγούμενο αποτέλεσμα, παίρνουμε το ζητούμενο.

Θεώρημα 4.3.1. *Έστω X_t μια διάχυση Itô*

$$dX_t = b(X_t)dt + \sigma(X_t)dB_t$$

Έστω επίσης μια $f \in C_0^2(\mathbb{R}^n)$. Τότε, $f \in \mathcal{D}_A$ και ισχύει ο τύπος:

$$Af(x) = \sum_i b_i(x)\frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{1}{2}\sum_{i,j}(\sigma \cdot \sigma^T)_{i,j}(x)\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \tag{4.11}$$

Η απόδειξη προκύπτει από το λήμμα 4.3.1 και τον ορισμό του A.

Παραδειγμα 4.3.1. *Ένα σημαντικό παράδειγμα γεννήτορα τελεστή είναι το ακόλουθο:*
Έστω

$$dX_t = dB_t$$

που έχει προφανώς ως λύση την n -διάστατη κίνηση Brown $\{B_t\}_{t \geq 0}$.
Εδώ έχουμε ότι $b = 0$, $\sigma = I_n$ (μοναδιαίος πίνακας)
Άρα έχουμε :

$$Af = \frac{1}{2}\sum_i^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} = \frac{1}{2}\triangle \tag{4.12}$$

Δηλαδή, ο γεννήτορας τελεστής που αντιστοιχεί στην κίνηση Brown είναι ο τελεστής Laplace.

Παραδειγμα 4.3.2. *(Γράφημα κίνησης Brown)*
Έστω $X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ η λύση της στοχαστικής διαφορικής εξίσωσης :

$$\left\{ \begin{array}{ll} dX_1 = dt; & X_1(0) = t_0 \\ dX_2 = dB; & X_2(0) = x_0 \end{array} \right\}$$

που μπορεί να γραφεί και ως:

$$dX_t = bdt + \sigma dB$$

$$X(0) = \begin{pmatrix} t_0 \\ x_0 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \sigma = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Τότε, ο γεννήτορας τελεστής που αντιστοιχεί στην διάχυση $(X_t)_{t \geq 0}$ είναι ο ακόλουθος:

$$Af = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}; \quad f \in C_0^2(\mathbb{R}^n) \tag{4.13}$$

Θα συμβολίζουμε τον διαφορικό τελεστή στο δεξιό μέλος (που αντιστοιχεί στην διάχυση Itô) με $L = L_X$, ενώ τον γεννήτορα τελεστή $A = A_X$. Σύμφωνα με το προηγούμενο θεώρημα, $A_X = L_X$, στα στοιχεία του χώρου $C_0^2(\mathbb{R}^n)$.

Συνδυάζοντας το προηγούμενο λήμμα και θεώρημα, παίρνουμε το εξής αποτέλεσμα :

Θεώρημα 4.3.2. *(φόρμουλα Dynkin)*
Έστω $f \in C_0^2(\mathbb{R}^n)$ και τ ένας χρόνος διακοπής με $E^x[\tau] < \infty$. Τότε, έχουμε ότι :

$$E^x[f(X_\tau)] = f(x) + E^x\left[\int_0^\tau Af(X_s)ds\right] \tag{4.14}$$

Παρατήρηση 4.3.1. *Αν ο τ αποτελεί τον πρώτο χρόνο εξόδου από κάποιο φραγμένο σύνολο, τότε η σχέση αυτή επεκτείνεται για κάθε $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$.*

Η φόρμουλα του *Dynkin* μας επιτρέπει να δούμε με σχετική ευκολία κάποιες ιδιότητες της κίνησης *Brown*. Ένα παράδειγμα είναι το ακόλουθο :

Παραδειγμα 4.3.3. *Θεωρούμε μια κίνηση Brown B_t στις n διαστάσεις με σημείο εκκίνησης το a, $\tau = \sigma_k = k \wedge \tau_K$, όπου $K = \{x \in \mathbb{R}^n : |x| < R\}$, $f \in C_0^2(\mathbb{R}^n)$ με $f(x) = |x|^2$, $|x| < R$. Ο τ_K αποτελεί τον πρώτο χρόνο εξόδου απο το σύνολο K και ο τ, εξ' ορισμού, είναι ένας πεπερασμένος χρόνος διακοπής. Εφαρμόζουμε την φόρμουλα του Dynkin και παίρνουμε :*

$$\begin{aligned}
E^a[f(B_{\sigma_k})] &= f(a) + E^a\left[\int_0^{\sigma_k} \frac{1}{2}\triangle f(B_s)ds\right] \\
&= |a|^2 + E^a\left[\int_0^{\sigma_k} nds\right] \\
&= |a|^2 + n \cdot E^a[\sigma_k]
\end{aligned}$$

Άρα, $E^a[\sigma_k] \leq \frac{1}{n}(R^2 - |a|^2)$, για όλα τα k. Παίρνοντας το όριο για $k \to \infty$, συμπεραίνουμε ότι :

$$\tau_K = \lim_{k\to\infty} \sigma_k < +\infty \ \text{ και ότι } \ E^a[\tau_K] = \frac{1}{n}(R^2 - |a|^2) \tag{4.15}$$

Δηλαδή προκύπτει το συμπέρασμα ότι ο χρόνος εξόδου της κίνησης Brown από οποιοδήποτε φραγμένο σύνολο είναι πεπερασμένος και έχουμε και μια εκτίμηση του στη μορφή της μέσης τιμής.

Ορισμός 4.3.2. *(Χαρακτηριστικός Τελεστής)*
Έστω $\{X_t\}_{t\geq 0}$ μια διάχυση Itô. Ο χαρακτηριστικός τελεστής $\mathcal{A} = \mathcal{A}_X$ της διάχυσης ορίζεται ως εξής :

$$\mathcal{A}f(x) = \lim_{U\downarrow x} \frac{E^x[f(X_{\tau_U})] - f(x)}{E^x[\tau_U]}, \tag{4.16}$$

όπου με U θεωρούμε μια φθίνουσα ακολουθία από ανοικτά σύνολα που συγκλίνουν στο x, δηλαδή $\{U_k\}_{k=1}^{\infty}$ φθίνουσα ακολουθία ανοικτών έτσι ώστε :

$$\bigcap_{k=1}^{\infty} U_k = \{x\} \text{ και } \tau_U = inf\{t > 0 : X_t \notin U\}$$

ο πρώτος χρόνος εξόδου της X_t από το U. Το σύνολο των συναρτήσεων για τις οποίες το όριο αυτό υπάρχει για κάθε $x \in \mathbb{R}^n$ συμβολίζεται με $\mathcal{D}_{\mathcal{A}}$. Αν τώρα $E^x[\tau_U] = \infty\ \forall U \ni x$, τότε θα ορίσουμε $\mathcal{A}f = 0$.

Θεώρημα 4.3.3. *Αποδεικνύεται ότι ισχύει η σχέση $\mathcal{D}_A \subset \mathcal{D}_{\mathcal{A}}$ και ότι :*

$$Af = \mathcal{A}f \quad \forall f \in \mathcal{D}_A. \tag{4.17}$$

Επίσης έχουμε ότι :

$$\mathcal{A}_X = L_X, \quad \forall f \in C^2 \tag{4.18}$$

(βλ. Dynkin (1965I,σελ. 143)))

Παρατήρηση 4.3.2. *Έχουμε διαπιστώσει τελικά ότι μια διάχυση Itô έχει αρκετές ιδιότητες. Είναι συνεχής, έχει την ισχυρή μαρκοβιανή ιδιότητα και το πεδίο ορισμού του χαρακτηριστικού τελεστή της περιέχει το C^2. Άρα, πρόκειται για μια διάχυση κατά Dynkin. (1965I)*

Στο επόμενο κεφάλαιο θα δούμε πως αυτές ιδιότητες θα μας βοηθήσουν για να αποδείξουμε το θεώρημα $Feynman - Kac$ και να συνδέσουμε την προηγούμενη θεωρία περί στοχαστικών ανελίξεων με την εξίσωση του Schrödinger στην Κβαντομηχανική.

Κεφάλαιο 5

Μαθηματικός Φορμαλισμός και αξιώματα στην Κβαντομηχανική

Για να προχωρήσουμε στη μελέτη της Κβαντομηχανικής είναι απαραίτητο να έχουμε κάποιου είδους αξιώματα, τα οποία θα μας βοηθήσουν στο να πάρουμε συγκεκριμένα αποτελέσματα που θα έχουν φυσική ερμηνεία, δηλαδή θα μας βοηθήσουν να καταλάβουμε την φυσική στην κλίμακα των σωματιδίων. Άρα, στη συνέχεια θα δούμε τα αξιώματα αυτά και το μαθηματικό φορμαλισμό που θα μας βοηθήσουν να θεμελιώσουμε την Κβαντομηχανική.

Αξίωμα (1): Κάθε κβαντικό σύστημα αντιστοιχεί σε ένα απειροδιάστατο, διαχωρίσιμο χώρο *Hilbert* (ο οποίος στη Φυσική αναφέρεται ως ο χώρος καταστάσεων).

Αξίωμα (2): Το σύνολο των παρατηρήσιμων μεγεθών $\mathcal{A}$ σε ένα κβαντικό σύστημα το οποίο αντιστοιχεί στον χώρο *Hilbert* $\mathcal{H}$ αποτελείται από τους ερμιτιανούς τελεστές που ορίζονται στον $\mathcal{H}$ και το υποσύνολο του $A_0 = A \cap l(\mathcal{H})$ των φραγμένων παρατηρήσιμων μεγεθών είναι διανυσματικός χώρος πάνω στο $\mathbb{R}$.

Αξίωμα (3): Το σύνολο των καταστάσεων l ενός κβαντικού συστήματος αποτελείται από θετικούς (και άρα ερμιτιανούς) *trace class* τελεστές M, με $TrM = 1$. Καθαρές καταστάσεις είναι τελεστές προβολής πάνω σε μονοδιάστατους υποχώρους του $\mathcal{H}$. Για $\psi \in \mathcal{H}$ με $\|\psi\| = 1$, η προβολή συμβολίζεται με P_ψ. Όλες οι υπόλοιπες καταστάσεις λέγονται μικτές.

Αξίωμα (4): Μια διαδικασία μέτρησης είναι η αντιστοιχία

$$\mathcal{A} \times l \ni (A, M) \to \mu_A \in \mathcal{P}(\mathbb{R}) \tag{5.1}$$

η οποία αντιστοιχεί σε κάθε παρατηρήσιμο μέγεθος $A \in \mathcal{A}$ και κατάσταση $M \in l$, ένα μέτρο πιθανότητας μ_A στον $\mathbb{R}$.

Για κάθε $E \subset \mathbb{R}$ $Borel$, η ποσότητα $\mu_A(E)$ είναι η πιθανότητα το αποτέλεσμα της μέτρησης του A, για ένα σύστημα που βρίσκεται στην κατάσταση $M \in l$, να βρεθεί στο σύνολο E.

Επομένως η μέση τιμή του μεγέθους $A \in \mathcal{A}$ που βρίσκεται στην κατάσταση $M \in l$ είναι

$$\langle A|M \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\mu_A(\lambda) \tag{5.2}$$

όπου με $\mu_A(\lambda) = \mu_A((-\infty, \lambda))$ συμβολίζουμε την κατανομή του μέτρου μ_A.

Το σύνολο των καταστάσεων l είναι κυρτό και σύμφωνα με το θεώρημα Hilbert -Schmidt για συμπαγείς ερμιτιανούς τελεστές, για κάθε κατάσταση M, υπάρχει ορθοκανονικό σύνολο $\{\psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ στον $\mathcal{H}$ τέτοιο ώστε

$$M = \sum_{n=1}^{\infty} a_n P_{\psi_n}, \ \ TrM = \sum_{n=1}^{\infty} a_n = 1 \tag{5.3}$$

όπου $a_n > 0$ μη μηδενικές ιδιοτιμές του M.

Θα δούμε στη συνέχεια πως μπορούμε να κατασκευάσουμε τα μέτρα μ_A και για να γίνει αυτό, θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε το γενικευμένο φασματικό θεώρημα του Von Neumann . Θα ακολουθήσουν κάποιοι ορισμοί που είναι απαραίτητοι για τη διατύπωση του θεωρήματος.

Ορισμός 5.0.1. *Ένα μέτρο προβολών στον $\mathbb{R}$ είναι μια απεικόνιση*

$$P : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \to L(\mathcal{H})$$

που ικανοποιεί τις εξής ιδιότητες :
(a) $\forall E \subset \mathcal{B}(\mathbb{R})$, το $P(E)$ αποτελεί μια ορθογώνια προβολή, δηλαδή

$$P(E) = P(E)^2, \ P(E) = P(E)^*$$

(β) $P(\emptyset) = 0, \ \ P(\mathbb{R}) = I$
(γ) Αν $(E_n)_{n=1}^{\infty}$, $E_n \cap E_m = \emptyset$, *για* $m \neq n$, *και* $E = \cup_{n=1}^{\infty} E_n$ *(δηλαδή έχουμε μια διαμέριση του* E*), τότε*

$$P(E) = \lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n} P(E_i) \ \ \text{στην ισχυρή τοπολογία του } L(\mathcal{H})$$

Ορισμός 5.0.2. *Για κάθε μέτρο προβολών μπορούμε να ορίσουμε την κατανομή του μέτρου προβολών ως εξής*

$$P(\lambda) = P((-\infty, \lambda)) \tag{5.4}$$

Θεώρημα 5.0.1. *(Γενικευμένο Φασματικό θεώρημα του Von Neumann)*
Για κάθε ερμιτιανό τελεστή A *στον χώρο Hilbert* $\mathcal{H}$*, υπάρχει μοναδική* $P(\lambda)$ *που να ικανοποιεί τα εξής:*
(α)

$$D(A) = \{\phi \in \mathcal{H} : \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d(P(\lambda)\phi, \phi) < \infty\}$$

και για κάθε $\phi \in D(A)$ *έχουμε*

$$A\phi = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dP(\lambda)\phi \tag{5.5}$$

που είναι ορισμένο ως ένα όριο Riemann-Stieltjes αθροισμάτων στην ισχυρή τοπολογία του $\mathcal{H}$*. Ο φορέας της κατανομής του μέτρου προβολών* $P(\lambda)$ *ταυτίζεται με το φάσμα του* $A : \lambda \in \sigma(A)$ *αν και μόνο αν*

$$P_A((\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon)) \neq 0, \ \forall \epsilon > 0$$

(β) Για κάθε $f \in C(\mathbb{R})$*, ο* $f(A)$ *αποτελεί γραμμικό τελεστή στον* $\mathcal{H}$ *με*

$$D(f(A)) = \{\phi \in \mathcal{H} : \int_{-\infty}^{\infty} |f(\lambda)|^2 d(P(\lambda)\phi, \phi) < \infty\}$$

και πυκνό πεδίο ορισμού, δηλαδή $\overline{D(f(A))} = \mathcal{H}$*.*
Έχουμε για κάθε $\phi \in D(f(A))$ *ότι:*

$$f(A)\phi = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) dP(\lambda)\phi \tag{5.6}$$

Επίσης θα ικανοποιείται η εξής σχέση :

$$f(A)^* = \bar{f}(A) \tag{5.7}$$

(γ) Για κάθε μετρήσιμη f *στο* $\mathbb{R}$*, που να είναι πεπερασμένη σχεδόν βεβαίως ως προς το μέτρο προβολών* P*, το* $f(A)$ *αποτελεί γραμμικό τελεστή ορισμένο*

όπως στο (β) με την διαφορά ότι το ολοκλήρωμα για το $f(A)\phi$ ορίζεται με την ασθενή έννοια ως εξής:
Για $\phi \in D(f(A))$ και για κάθε $\psi \in \mathcal{H}$,

$$(f(A)\phi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) d(P(\lambda)\phi, \psi)$$

που αποτελεί ένα $Lebesgue - Stieltjes$ ολοκλήρωμα ως προς κάποιο μιγαδικό μέτρο.
(δ) Ένας φραγμένος τελεστής B αντιμετατίθεται με τον A, δηλαδή $B(D(A)) \subset D(A)$ και $AB = BA$ στο $D(A)$ αν και μόνο αν αντιμετατίθεται με τον $P(\lambda)$ $\forall \lambda$ και επομένως ο B θα αντιμετατίθεται με κάθε $f(A)$.

(ε) Για κάθε κατανομή μέτρου προβολών $P(\lambda)$, ο τελεστής A έτσι όπως ορίστηκε στο (α) αποτελεί ερμιτιανό τελεστή.

Χρησιμοποιώντας τώρα το φασματικό θεώρημα, μπορούμε να περιγράψουμε την αντιστοιχία

$$(A, M) \to \mu_A$$

ως εξής:

Αξίωμα (5): Το μέτρο πιθανότητας μ_A στον $\mathbb{R}$ που ορίζει την αντιστοιχία $\mathcal{A} \times l \to \mathcal{P}(\mathbb{R})$ δίνεται από την σχέση Born-Von Neumann

$$\mu_A(E) = Tr P_A(E) M, \quad E \in \mathcal{B}(\mathbb{R}) \tag{5.8}$$

όπου με P_A συμβολίζουμε το μέτρο προβολών που συσχετίζεται με τον ερμιτιανό τελεστή A, μέσω του φασματικού θεωρήματος.

Χρησιμοποιώντας πάλι το θεώρημα Hilbert-Schmidt για συμπαγείς ερμιτιανούς τελεστές, μπορούμε να γράψουμε την εξής σχέση:

$$\mu_A(E) = \sum_{n=1}^{N} a_n (P_A(E)\psi_n, \psi_n) = \sum_{n=1}^{N} a_n \left\| P_A(E)\psi_n \right\|^2 \leq \sum_{n=1}^{N} a_n = 1,$$

επομένως έχουμε ότι $0 \leq \mu_A(E) \leq 1$. Επιπλέον, συμβολίζουμε με $\mu_A(\lambda)$ την συνάρτηση κατανομής του μέτρου μ_A και έχουμε ότι

$$\mu_A(\lambda) = (P_A(\lambda)\psi, \psi), \;\; \text{για } M = P_\psi$$

Πρόταση 5.0.1. *Ας υποθέσουμε ότι έχουμε ένα παρατηρήσιμο μέγεθος* $A \in \mathcal{A}$ *και μια κατάσταση* $M \in l$ *με* $\langle A|M\rangle < \infty$ *και* $ImM \subset D(A)$. *Τότε,*

$$A \cdot M \in l_1 \ (trace\ class) \quad \textit{και} \quad < A|M > = TrAM$$

Επίσης, αν $M = P_\psi$ *και* $\psi \in D(A)$, *τότε θα έχουμε ότι*

$$\langle A|M\rangle = (A\psi, \psi) \ \ \textit{και} \ \ \langle A^2|M\rangle = \|A\psi\|^2$$

Απόδειξη : Έστω $\{e_n\}_{n=1}^{\infty}$ ορθοκανονική βάση του $\mathcal{H}$. Αφού

$$\mu_A(E) = TrP_A(E)M = \sum_{n=1}^{\infty}(P_A(E)Me_n, e_n),$$

θέτουμε

$$\mu_n(E) = (P_A(E)Me_n, e_n),$$

τα οποία αποτελούν πεπερασμένα μέτρα για κάθε $n \in \mathbb{N}$. Επίσης, για κάθε $E \in \mathcal{B}(\mathcal{R})$, έχουμε ότι $\mu_A(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n(E)$.
Επειδή ισχύει ότι

$$\int_{\mathbb{R}} f d\mu_A = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\mathbb{R}} f d\mu_n$$

για κάθε f που είναι ολοκληρώσιμη ως προς το μ_A, από το φασματικό θεώρημα θα έχουμε ότι:

$$\sum_{n=1}^{\infty}(AMe_n, e_n) = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\mu_n(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\mu_A(\lambda) < \infty$$

Άρα,

$$A \cdot M \in l_1 \ (trace\ class) \quad \text{και} \quad < A|M > = TrAM$$

Εάν τώρα $M = P_\psi$ και $\psi \in D(A)$ θα έχουμε

$$\langle A|M\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(P_A(\lambda)\psi, \psi) = (A\psi, \psi)$$

Επίσης από φασματικό θεώρημα και φόρμουλα αλλαγής μεταβλητών, έχουμε ότι

$$\|A\psi\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(P_A(\lambda)\psi, \psi) = \int_{0}^{\infty} \lambda d(P_{A^2}(\lambda)\psi, \psi) = \langle A^2|M\rangle$$

Πόρισμα 5.0.1. *Αν* $\langle A|M\rangle$, $\langle A^2|M\rangle < \infty$, *τότε* $A \cdot M \in l_1(\mathcal{H})$ *και* $\langle A|M\rangle = TrAM$

Απόδειξη : Αφού

$$\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\mu_n(\lambda) \leq \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\mu_A(\lambda) = \langle A|M\rangle < \infty,$$

παίρνουνε ότι $e_n \in D(AM)$ $\forall n \in \mathbb{N}$ και επομένως το επιθυμητό αποτέλεσμα προκύπτει από την προηγούμενη πρόταση.

Παρατήρηση 5.0.1. *Είναι συχνά χρήσιμο να προσεγγίζουμε ερμιτιανούς τελεστές που δεν είναι απαραίτητα φραγμένοι, από φραγμένους. Αυτό είναι εφικτό με την παρακάτω διαδικασία:*
Θέτουμε $A_n = f_n(A)$, όπου $f_n = \mathcal{X}_{[-n,n]}$. Αν $< A|M >$ υπάρχει, τότε

$$\langle A|M\rangle \ = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\mu_A(\lambda) = \lim_{n\to\infty} \int_{-n}^{n} \lambda d\mu_A(\lambda) = \lim_{n\to\infty} \langle A_n|M\rangle$$

5.1 Σχέσεις απροσδιοριστίας Heisenberg

Η διασπορά ενός παρατηρήσιμου μεγέθους A στη κατάσταση M δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$\sigma_M^2(A) = \ \langle A^2|M\rangle - \langle A|M\rangle^2 \geq 0$$

αν οι ποσότητες αυτές υπάρχουν.
Από την πιο πάνω πρόταση, έχουμε για $M = P_\psi$ και $\psi \in D(A)$

$$\sigma_M^2(A) = \|A\psi\|^2 - (A\psi, \psi)^2 \tag{5.9}$$

Λήμμα 5.1.1. *Για $A \in \mathcal{A}$ και $M \in l$,*

$$\sigma_M^2(A) = 0 \Leftrightarrow IM[M] \ \textit{ιδιόχωρος για τον } A \textit{ με ιδιοτιμή } a = \langle A|M\rangle$$

Πιο συγκεκριμένα, αν $M = P_\psi$, τότε ψ αποτελεί ιδιοδιάνυσμα του A, δηλαδή $A\psi = a\psi$.

Απόδειξη: Από το φασματικό θεώρημα,

$$\sigma_M^2(A) = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - a)^2 d\mu_A(\lambda)$$

και άρα $\sigma_M^2(A) = 0$ αν και μόνον αν ο φορέας του μέτρου είναι το σημείο $a \in \mathbb{R}$ (δηλαδή $\mu(\{a\}) = 1$).

Όμως $\mu_A(\{a\}) = TrP_A(\{a\})M, \ \ TrM = 1$ και άρα αυτό ισοδυναμεί με το ότι $IM[M]$ αποτελεί αναλλοίωτο υπόχωρο του $P_A(\{a\})$. Προκύπτει από το φασματικό θεώρημα ότι $IM[M]$ ιδιόχωρος του A με ιδιοτιμή την a.
Θα διατυπώσουμε τώρα τις γενικευμένες αρχές αβεβαιότητας του Heisenberg :

Πρόταση 5.1.1. *Έστω $A, B \in \mathcal{A}$ και $M = P_\psi$ μια καθαρή κατάσταση τέτοια ώστε $\psi \in D(A) \cap D(B)$ και $A\psi, B\psi \in D(A) \cap D(B)$. Τότε, ισχύει η ακόλουθη ανισότητα :*

$$\sigma_M^2(A) \cdot \sigma_M^2(B) \geq \frac{1}{4} \langle i[A, B] | M \rangle^2 \tag{5.10}$$

Η ίδια ανισότητα μάλιστα θα ισχύει για κάθε $M \in l$ όπου ορίζουμε $\langle i[A, B] | M \rangle = \lim_{n \to \infty} \langle i[A_n, B_n] | M \rangle$ (δηλαδή προσεγγίζουμε μη φραγμένους τελεστές από φραγμένους με τον τρόπο που είδαμε προηγουμένως.)

Απόδειξη : Θέτουμε $M = P_\psi$. Επειδή ισχύει η

$$[A - \langle A|M \rangle I, B - \langle B|M \rangle I] = [A, B],$$

αρκεί να δειχθεί η ακόλουθη ανισότητα:

$$\langle A^2 | M \rangle \cdot \langle B^2 | M \rangle \geq \frac{1}{4} \ \langle i[A, B] | M \rangle^2$$

Έχουμε ότι για κάθε $a \in \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned} \|(A + iaB)\psi\|^2 &= a^2(B\psi, B\psi) - ia(A\psi, B\psi) + ia(B\psi, A\psi) + (A\psi, A\psi) \\ &= a^2(B^2\psi, \psi) + a(i[A, B]\psi, \psi) + (A^2\psi, \psi) \geq 0 \end{aligned}$$

Επομένως θα πρέπει να ισχύει αναγκαστικά ότι

$$4(A^2\psi, \psi)(B^2\psi, \psi) \geq (i[A, B]\psi, \psi)^2$$

Το ίδιο επιχείρημα ισχύει και για τις μικτές καταστάσεις. Αφού

$$\sigma_M^2(A) \cdot \sigma_M^2(B) = \lim_{n \to \infty} \sigma_M^2(A_n) \cdot \sigma_M^2(B_n),$$

μας είναι αρκετό να αποδείξουμε την ανισότητα για φραγμένους τελεστές A,B. Χρησιμοποιούμε την κυκλική ιδιότητα του ίχνους και παίρνουμε ότι για κάθε $a \in \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned} 0 &\leq Tr((A + iaB)M(A + iaB)^*) = Tr((A + iaB)M(A - iaB)) \\ &= a^2 TrBMB + iaTrBMA - iaTrAMB + TrAMA \\ &= a^2 TrB^2M + aTr(i[A, B]M) + TrA^2M \end{aligned}$$

Επομένως,

$$4TrA^2MTrB^2M \geq Tr(i[A, B]M)^2$$

Οι αρχές της αβεβαιότητας μας δίνουν ένα πολύ σημαντικό αποτέλεσμα, ότι δηλαδή ακόμα και σε καθαρές καταστάσεις, παρατηρήσιμα μεγέθη που δεν αντιμετατίθενται δεν μπορούν να μετρηθούν ταυτοχρόνως. Αυτή είναι μια μεγάλη διαφορά ανάμεσα στην κλασική μηχανική και την κβαντομηχανική.

5.2 Εξίσωση του Schrödinger

Θα δούμε σε συντομία κάποιες από τις βασικές ιδιότητες της εξίσωσης του Schrödinger .

Ας θεωρήσουμε ένα κβαντικό σωματίδιο που κινείται στον $\mathbb{R}^n$, σε δυναμικό V. Για λόγους απλότητας θεωρούμε $h = 1$, $m = \frac{1}{2}$ και $x = (x_1, \ldots . x_n) \in \mathbb{R}^n$
Ο τελεστής Hamilton θα δίνεται από την διαφορική έκφραση :

$$H = - \triangle + V(x),$$

όπου $\triangle = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \cdots + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} \right)$ ο τελεστής Laplace . Συνήθως χρησιμοποιείται ο συμβολισμός $H = H_0 + V$, όπου $H_0 = - \triangle$ ο τελεστής Hamilton για ελεύθερο σωματίδιο.

Ο H_0 είναι ερμιτιανός και μη φραγμένος στον χώρο $H = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$, με πεδίο ορισμού $D(H_0) = W^{2,2}(\mathbb{R}^n)$ και απολύτως συνεχές φάσμα. Ενώ ο V είναι ερμιτιανός και θα είναι φραγμένος αν και μόνο αν $V(x) \in \mathcal{L}^\infty(\mathbb{R}^n)$, με $\|V\| = \|V\|_\infty$.

Το άθροισμα $H_0 + V$ δεν είναι απαραιτήτως ερμιτιανός και επομένως ένα μεγάλο μαθηματικό ζήτημα στην κβαντομηχανική είναι ο χαρακτηρισμός δυναμικών για τους οποίους η αντίστοιχη διαφορική έκφραση ορίζει με μοναδικό τρόπο ένα ερμιτιανό τελεστή H στον $\mathcal{H}$.

5.3 Δυναμική κβαντικών συστημάτων

Ορισμός 5.3.1. *Θα λέμε ότι δύο τελεστές μετατίθενται, αν το γινόμενο*

$$A \cdot B = B \cdot A \Leftrightarrow A \cdot B - B \cdot A = 0$$

Ορισμός 5.3.2. *Έστω A,B δύο παρατηρήσιμα μεγέθη. Ο αντιμεταθέτης τους ορίζεται ώς εξής:*

$$[A, B] = A \cdot B - B \cdot A$$

Προφανώς, εάν δύο τελεστές μετατίθενται, τότε η ποσότητα αυτή είναι ίση με το 0.

Επειδή το γινόμενο δύο ερμιτιανών τελεστών που δεν αντιμετατίθενται δεν είναι ερμιτιανός τελεστής, για να περιγράψουμε την δυναμική (δηλαδή την χρονική εξέλιξη) ενός κβαντικού συστήματος, θα πρέπει να περιοριστούμε σε ένα υποσύνολο του $\mathcal{A}$.

Ο πραγματικός διανυσματικός χώρος $\mathcal{A}_0$ των φραγμένων παρατηρήσιμων μεγεθών έχει δομή Lie άλγεβρας, η οποία χαρακτηρίζεται από τον μεταθέτη:

$$i[A, B] = i(AB - BA), \quad A, B \in \mathcal{A}_0 \tag{5.11}$$

Η χρονική εξέλιξη ενός κβαντικού συστήματος με τον χώρο καταστάσεων του $\mathcal{H}$ μπορεί να περιγραφεί πλήρως από ένα συγκεκριμένο παρατηρήσιμο μέγεθος, τον τελεστή Hamilton : $H \in \mathcal{A}$

Η δομή Lie άλγεβρας του $\mathcal{A}_0$ οδηγεί στις κβαντικές εξισώσεις κίνησεις και οι καταστάσεις του $\mathcal{H}$ είναι χρονοανεξάρτητες, δηλαδή :

$$\frac{dM}{dt} = 0, \quad M \in l$$

Ενώ παράλληλα τα φραγμένα παρατηρήσιμα μεγέθη θα ικανοποιούν την εξίσωση κίνησης :

$$\frac{dA}{dt} = \{H, A\}_\hbar, \quad A \in \mathcal{A}_0 \tag{5.12}$$

όπου $\{,\}_\hbar = \frac{i}{\hbar}[,]$ τα γνωστά quantum brackets (αντιμεταθέτες) που είναι ουσιαστικά τα $\hbar-$ εξαρτημένα $Lie - brackets$ της $\mathcal{A}_0$.
Η εξίσωση κίνησης ($Heisenberg$) είναι καλώς ορισμένη όταν $H \in \mathcal{A}_0$, αφού αν συμβολίσουμε με $U(t)$ μια ισχυρώς συνεχή μονοπαραμετρική ομάδα ορθομοναδιαίων τελεστών που να συσχετίζεται με τον Η με την εξής σχέση :

$$U(t) = exp(-\frac{i}{\hbar}tH), \quad t \in \mathbb{R} \tag{5.13}$$

τότε θα ικανοποιείται η διαφορική εξίσωση

$$i\hbar\frac{dU(t)}{dt} = HU(t) = U(t)H \tag{5.14}$$

και η λύση $A(t)$ της εξίσωσης κίνησης με $A(0) = A \in \mathcal{A}_0$ θα δίνεται από την παρακάτω σχέση :

$$A(t) = U(t)^{-1}AU(t) \tag{5.15}$$

Μπορούμε τώρα να ορίσουμε τον τελεστή εξέλιξης ως εξής :

$$U_t : \mathcal{A} \to \mathcal{A}, \quad U_t(A) = A(t)$$

ο οποίος αποτελεί αυτομορφισμό για την οικογένεια των φραγμένων παρατηρήσιμων μεγεθών $\mathcal{A}_0$.

Θεώρημα 5.3.1. ***Θεώρημα αναπαράστασης του Stone***
Αν $U(t)$ είναι μια ισχυρώς συνεχής μονοπαραμετρική ομάδα ορθομοναδιαίων τελεστών, τότε ισχύουν τα ακόλουθα :

$$U(t) = exp(-\frac{i}{\hbar}tH), \quad \forall t \in \mathbb{R} \tag{5.16}$$

και

$$D(H) = \{\phi \in \mathcal{H} : \lim_{t\to 0} \frac{U(t)-I}{t}\phi \text{ υπάρχει } \}, \quad H\phi = i\hbar\frac{U(t)-I}{t}\phi \tag{5.17}$$

Αξίωμα (6): Η δυναμική ενός κβαντικού συστήματος περιγράφεται πλήρως από την ισχυρώς συνεχή μονοπαραμετρική ομάδα $U(t)$ ορθομοναδιαίων τελεστών. Οι κβαντικές καταστάσεις $l \ni M \to M(t) = M \in l$ δεν εξαρτώνται από τον χρόνο και η εξάρτηση από τον χρόνο των παρατηρήσιμων μεγεθών δίνεται από τον τελεστή εξέλιξης :

$$U_t, \;\; A(t) = U_t(A) = U(t)^{-1}AU(t)$$

Η περιγραφή αυτή λέγεται εικόνα του Heisenberg .

Ας σημειώσουμε ότι υπάρχει μια αντίστοιχη περιγραφη κατά τον Shrödinger, που λέει ότι είναι οι καταστάσεις που εξαρτώνται από τον χρόνο σύμφωνα με την ακόλουθη σχέση :

$$M(t) = U_{-t}(M) = U(t)MU(t)^{-1} \tag{5.18}$$

και τα παρατηρήσιμα μεγέθη είναι χρονοανεξάρτητα (Εικόνα του Shrödinger). Οι δύο περιγραφές είναι ισοδύναμες, δηλαδή μπορούμε να έχουμε το 7_o αξίωμα και με την δεύτερη μορφή.

Ορισμός 5.3.3. *Ένα παρατηρήσιμο μέγεθος θα λέγεται κβαντικό ολοκλήρωμα κίνησης, αν :*

$$\frac{dA(t)}{dt} = 0 \tag{5.19}$$

Άρα, ένα παρατηρήσιμο μέγεθος $A \in \mathcal{A}$ θα λέγεται κβαντικό ολοκλήρωμα κίνησης αν και μόνο αν αντιμετατίθεται με τον τελεστή H έτσι ώστε :

$$\{H, A\}_\hbar = \frac{i}{\hbar}[H, A] = 0$$

Η χρονική εξέλιξη μιας καθαρής κατάστασης $M = P_\psi$ θα δίνεται από την

$$M(t) = P_{\psi(t)}, \;\; \psi(t) = U(t) \cdot \psi$$

Αφού $D(H)$ παραμένει αναλλοίωτος από την ομάδα $U(t)$, προκύπτει ότι η $\psi(t) = U(t) \cdot \psi$ ικανοποιεί την χρονοεξαρτημένη εξίσωση του Shrödinger ,

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = H\psi \tag{5.20}$$

Ορισμός 5.3.4. *Μια κατάσταση θα λέγεται στάσιμη, αν υπό το αξίωμα κατα Shrödinger , έχουμε ότι*

$$\frac{dM(t)}{dt} = 0 \Leftrightarrow [M, U(t)] = 0 \; \forall t \Leftrightarrow \{H, M\}_\hbar = 0 \tag{5.21}$$

Ένα θεμελιώδες αποτέλεσμα είναι το ακόλουθο:

Πρόταση 5.3.1. *Μια καθαρή κατάσταση $M = P_\psi$ είναι στάσιμη, αν και μόνο αν η ψ αποτελεί ιδιοδιάνυσμα του τελεστή H. (δηλαδή $H\psi = \lambda\psi$)*
και στην περίπτωση μας έχουμε ότι $\psi(t) = exp(-\frac{i}{\hbar}\lambda t)\psi$
(Τα λ αυτά έχουν φυσική σημασία και αποτελούν τις στάθμες ενέργειας του κβαντικού συστήματος.)

Για να το αποδείξουμε αυτό, θα χρειαστούμε το θεώρημα αναπαράστασης του Stone .

Απόδειξη της πρότασης : Επειδή $U(t)P_\psi = P_\psi U(t)$, προκύπτει ότι η ψ είναι ιδιοδιάνυσμα για τους ορθομοναδιαίους τελεστές $U(t)$ για κάθε t, αφού $U(t)\psi = |c(t)|\psi$, με $|c(t)| = 1$. Επειδή τώρα η $U(t)$ αποτελεί μια ισχυρώς συνεχή μονοπαραμετρική ομάδα ορθομοναδιαίων τελεστών, η συνεχής συνάρτηση $c(t) = (U(t)\psi, \psi)$ θα ικανοποιεί την εξίσωση $c(t_1 + t_2) = c(t_1)c(t_2)$ για κάθε $t_1, t_2 \in \mathbb{R}$ και άρα $c(t) = exp(-\frac{i}{\hbar}\lambda t)$, για κάποιο $\lambda \in \mathbb{R}$. Επομένως, από το θεώρημα του *Stone*,

$$\psi \in D(H), \quad H\psi = \lambda\psi \tag{5.22}$$

Κεφάλαιο 6

Path Integrals κατά Feynman

6.1 Φορμαλισμός και κατασκευή

Υπάρχει μια εναλλακτική προσέγγιση του Feynman για την κβαντομηχανική , που γίνεται μέσω του ορισμού των Path Integrals . Ουσιαστικά είναι η θεώρηση του τελεστή εξέλιξης

$$U(t) = exp(-\frac{i}{\hbar}tH)$$

ως ενός αθροίσματος πάνω σε όλες τις δυνατές τροχιές του αντίστοιχου κλασικού συστήματος.

Θεμελιώδης λύση της Shrödinger: Ας θυμηθούμε ότι η λύση για το πρόβλημα αρχικών τιμών για την χρονοεξαρτημένη εξίσωση του Shrödinger

$$i\hbar\frac{d\psi}{dt}(t) = H\psi(t)$$
$$\psi(t)|_{t=0} = \psi$$

δίνεται από την

$$\psi(t) = U(t)\psi$$

Για τον τελεστή Hamilton H που μπορεί να γραφεί και ως εξής :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(Q)$$

για ένα κβαντικό σωματίδιο που κινείται εντός δυναμικού $V(Q)$, όπου με P, Q συμβολίζουμε τους τελεστές ορμής και θέσης αντίστοιχα, έχουμε το αντίστοιχο πρόβλημα Cauchy

$$i\hbar\frac{d\psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi + V(q)\psi$$
$$\psi(q,t)|_{t=0} = \psi(q)$$

Κάτω από γενικευμένες απαιτήσεις για το δυναμικό $V(q)$, π.χ. $V \in \mathcal{L}^{\infty}_{loc}(\mathbb{R}^n)$ και κάτω φραγμένο, το πρόβλημα Cauchy θα έχει θεμελιώδη λύση μια συνάρτηση

$$K(q^{'}, q, t) \tag{6.1}$$

που θα ικανοποιεί την διαφορική εξίσωση (ως προς q) με την έννοια των κατανομών, δηλαδή θα αποτελεί ασθενή λύση της εξίσωσης Shrödinger και τότε η αρχική συνθήκη παίρνει την ακόλουθη μορφη :

$$K(q^{'}, q, t)|_{t=0} = \delta(q - q^{'}) \tag{6.2}$$

Άρα μπορούμε πλέον να γράψουμε την λύση του προβλήματος και ως :

$$\psi(q^{'}, t) = \int_{\mathbb{R}^n} K(q^{'}, q, t) \cdot \psi(q) d^n(q), \tag{6.3}$$

όπου αντιλαμβανόμαστε το ολοκλήρωμα με την έννοια των κατανομών.
Τώρα, για $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ η σχέση αυτή έχει την εξής έννοια :

$$\psi(q^{'}, t) = \lim_{R \to \infty} \int_{|q| \leq R} K(q^{'}, q, t) \cdot \psi(q) d^n(q) = \lim \int_{\mathbb{R}^n} K(q^{'}, q, t) \cdot \psi(q) d^n(q), \tag{6.4}$$

όπου το όριο είναι ως προς την $\mathcal{L}^2$ -νόρμα.
Γενικά η ψ θα αποτελεί ασθενή λύση του προβλήματος και μόνο σε ειδικές περιπτώσεις θα είναι ισχυρή λύση (π.χ. $\psi \in D_0$ (*Garding Domain*)).

Η $K(q^{'}, q, t)$ είναι ο πυρήνας του τελεστή εξέλιξης $U(t)$ σύμφωνα με το Schwatrz Kernel θεώρημα.
Χρησιμοποιώντας την ιδιότητα

$$U(t + t^{'}) = U(t) \cdot U(t^{'})$$

μπορούμε να ξαναγράψουμε την ολοκληρωτική σχέση ως εξής :

$$\psi(q^{'}, t^{'}) = \int_{\mathbb{R}^n} K(q', t', q, t) \psi(q, t) d^n q$$

όπου $K(q^{'}, t'; q, t) = K(q', q, t' - t)$ και η συνάρτηση $|K(q^{'}, t'; q, t)|^2$ έχει φυσική σημασία αφού αποτελεί την δεσμευμένη συνάρτηση κατανομής να βρεθεί το κβαντικό σωματίδιο στο σημείο (q', t'), ένω είχε ξεκινήσει από το σημείο (q, t). Στη φυσική ο πυρήνας αυτός λέγεται πλάτος (amplitude) , ενώ αν ακολουθήσει κανείς τον συμβολισμό του *Dirac*,

$$K(q^{'}, t'; q, t) = \langle q', t' | q, t \rangle \tag{6.5}$$

Ένα από τα θεμελιώδη ζητήματα στη Κβαντομηχανική είναι η εύρεση αυτού του πυρήνα, για κάποιο δοθέν κβαντικό σύστημα. Προκύπτει ότι αν έχουμε γνώση των φασματικών ιδιοτήτων του τελεστή H, μπορούμε σε κάποιες περιπτώσεις να υπολογίσουμε τον πυρήνα αυτό σε κλειστή μορφη.

Παραδειγμα 6.1.1. *Αν ο τελεστής Η έχει σημειακό φάσμα, δηλαδή υπάρχει ορθοκανονική βάση του χώρου Hilbert* $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n, d^n q)$ *από ιδιοσυναρτήσεις* $\{\psi_n(q)\}_{n=1}^{\infty}$ *με αντίστοιχες ιδιοτιμές τα* $\{E_n\}_{n=1}^{\infty}$*, τότε :*

$$\psi(q) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(q) \text{ και } c_n = \int_{\mathbb{R}^n} \psi(q) \overline{\psi_n(q)} d^n q$$

και άρα

$$(U(t)\psi)(q) = \sum_{n=0}^{\infty} exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) c_n \psi_n(q)$$

συνεπώς

$$\psi(q', t') = \sum_{n=0}^{\infty} exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t'\right) \psi_n(q) \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\psi_n(q)} \psi(q) d^n q$$

όπου η σειρά και το ολοκλήρωμα συκλίνουν ως προς την $\mathcal{L}^2$ *- νόρμα. Εάν με κάποιο τρόπο μπορούσαμε να δικαιολογήσουμε εναλλαγή σειράς και ολοκληρώματος, θα μπορούσαμε να γράψουμε το ακόλουθο :*

$$K(q', t'; q, t) = \sum_{n=0}^{\infty} exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n T\right) \psi_n(q') \overline{\psi_n(q)}, \text{ όπου } T = t' - t \tag{6.6}$$

Η σειρά αυτή τώρα θα συγκλίνει με την έννοια των κατανομών και μας δίνει μια αναπαράσταση του πυρήνα ως προς την φασματική ανάλυση του Η.

Μια παρόμοια διαδικασία μπορεί να γίνει και όταν ο Η έχει απολύτως συνεχές φάσμα, για να πάρουμε μια φασματική αναπαράσταση του πυρήνα.

Στη γενική περίπτωση όμως όπου $H = H_0 + V$, δεν μπορούμε να βρούμε έναν κλειστό τύπο για τον πυρήνα. Αυτό ισχύει διότι H_0 και V **δεν αντιμετατίθενται γενικά**, δηλαδή :

$$exp(-\frac{i}{\hbar} tH) \neq exp(-\frac{i}{\hbar} tH_0) \cdot exp(-\frac{i}{\hbar} tV)$$

Το γεγονός ότι οι τελεστές με τους οποίους ασχολούμαστε δεν αντιματατίθενται στην γενική περίπτωση είναι ένα μεγάλο εμπόδιο για να βρούμε μια αναπαράσταση για τον πυρήνα. Παρ' όλα αυτά, ο Feynman ανακάλυψε πως υπάρχει μια άλλη αναπαράσταση, συσχετίζοντας τον πυρήνα με το αντίστοιχο κλασικό σύστημα.

Θα ξεκινήσουμε με ένα θεώρημα των Lie-kato-Trotter ,που μας επιτρέπει να εκφράσουμε τον τελεστή $e^{i(A+B)}$ ως γινόμενο των e^{iA}, e^{iB}, όπου A,B δύο ερμιτιανοί που δεν αντιμετατίθενται.

Θεώρημα 6.1.1. *Έστω A,B δύο ερμιτιανοί τελεστές στον $\mathcal{H}$, έτσι ώστε ο τελεστής $A+B$ να είναι essentially self adjoint στο $D(A)\cap D(B)$. Τότε, για κάθε $\psi\in\mathcal{H}$,*

$$e^{i(A+B)}\psi = \lim_{n\to\infty}\left(e^{\frac{i}{n}A}\cdot e^{\frac{i}{n}B}\right)^n\psi \tag{6.7}$$

Θα κάνουμε άμεση εφαρμογή αυτού του θεωρήματος για τον τελεστη Hamilton $H=H_0+V$. Θεωρούμε ότι είναι essentially self adjoint στο $D(H_0)\cap D(V)$, έτσι ώστε να μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το θεώρημα και θέτουμε :

$$A=-\frac{T}{\hbar}H_0 \ \text{ και } \ B=-\frac{T}{\hbar}V$$

Παίρνουμε ότι :

$$exp(-\frac{i}{\hbar}TH)=\lim_{n\to\infty}\left[exp(-\frac{i}{\hbar}\Delta tH_0)exp(-\frac{i}{\hbar}\Delta tV)\right]^n,$$

όπου $\Delta t=\frac{T}{n}$, $T=t'-t$ και η σύγκλιση είναι στην ισχυρή τοπολογία των τελεστών.

Ο πυρήνας του τελεστή $exp(-\frac{i}{\hbar}\Delta tH_0)$ δίνεται από την ακόλουθη σχέση

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\int_{\mathbb{R}^n}exp\left[\frac{i}{\hbar}(p(q'-q)-\frac{p^2}{2m}\Delta t)\right]d^np$$

Για λόγους απλότητας όμως θα θεωρήσουμε ότι έχουμε μονοδιάστατο χώρο και επομένως ο πυρήνας του

$$exp(\frac{-i\Delta tH_0}{\hbar})\cdot exp(\frac{-i\Delta tV}{\hbar})$$

θα δίνεται από την ακόλουθη σχέση :

$$K(q',q;\Delta t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}exp\left[\frac{i}{\hbar}(p(q'-q)-(\frac{p^2}{2m}+V(q))\Delta t)\right]dp \tag{6.8}$$

(διότι γνωρίζουμε τον πυρήνα για την εξίσωση του ελεύθερου σωματιδίου και η δράση του τελεστή $exp(\frac{-i\Delta tV}{\hbar})$ είναι πολλαπλασιασμός στην χωρική αναπαράσταση.)

Επειδή είδαμε ότι ουσιαστικά ο πυρήνας για το γινόμενο δύο τελεστών είναι μια σύνθεση από τους επι μέρους πυρήνες, για τον πυρήνα $K_n(q',t';q,t)$ του

$$\left[exp(-\frac{i}{\hbar}\Delta tH_0)exp(-\frac{i}{\hbar}\Delta tV)\right]^n$$

παίρνουμε την αντίστοιχη ολοκληρωτική αναπαράσταση :

$$K_n(q', t'; q, t) = \int \cdots \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{k=0}^{n-1} K(q_{k+1}, q_k; \Delta t) \prod_{k=1}^{n-1} dq_k \tag{6.9}$$

, όπου $q_0 = q, ..., q_n = q'$.

Αντικαθιστούμε σε κάθε ένα παράγοντα $K(q_{k+1}, q_k; \Delta t)$ την αντίστοιχη αναπαράσταση από την προηγούμενη σχέση, όπου η αντίστοιχη μεταβλητή ολοκλήρωσης είναι η p_k. Αλλάζουμε την σειρά ολοκήρωσης και χρησιμοποιούμε την εφαρμογή του θεωρήματος $Lie - Kato - Trotter$. Τότε παίρνουμε το ακόλουθο αποτέλεσμα, όταν ο αριθμός των ολοκληρώσεων παέι στο άπειρο:

(Ας σημειώσουμε εδώ ότι η σύγκλιση δεν επιτυγχάνεται για το τυχόν δυναμικό V . Έχει αποδειχθεί από τον Fujiwara (1980) ότι για $V \in C^\infty$ έχουμε σύγκλιση και από τον Παπανικολάου (1989) ότι για δυναμικά συνεχή, φραγμένα και ολοκληρώσιμα στην πραγματική ευθεία επίσης έχουμε σύγκλιση)

$$K(q', t' : q, t) = \lim_{n\to\infty} K_n(q', t'; q, t)$$
$$= \lim_{n\to\infty} \int \cdots \int_{\mathbb{R}^{2n-1}} exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{k=0}^{n-1}(p_k(q_{k+1} - q_k) - H_c(p_k, q_k)\Delta t)\right) \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \prod_{k=1}^{n-1} \frac{dp_k dq_k}{2\pi\hbar}$$

όπου έχουμε συμβολίσει με $H_c(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$ την κλασική Χαμιλτονιανή.

Η σχέση αυτή μπορεί να ερμηνευτεί ως εξής :
Για κάθε σημείο $(p_0, p_1 \dots p_{n-1}, q_1, q_2, \dots q_{n-1}) \in \mathbb{R}^{2n-1}$ αναθέτουμε ένα γραμμικό μονοπάτι που συμβολίζουμε με σ στον επεκταμένο χώρο φάσεων του κλασικού σωματιδίου που να ορίζεται ως εξής :

Έστω $t_k = t + k\Delta t,\ \ \sigma(\tau) = (p(\tau), q(\tau), \tau)$,
όπου $p(\tau) = p_k$ και $q(\tau) = q_k + (\tau - t_k)\frac{q_{k+1}-q_k}{t_{k+1}-t_k},\ \ \tau \in [t_k, t_{k+1}]$

Τότε για το συγκεκριμένο $V(q)$ θα έχουμε ότι

$$\sum_{k=0}^{n-1}(p_k(q_{k+1} - q_k) - H_c(p_k, q_k)\Delta t) = S(\sigma) + \mathcal{O}(1)$$

καθώς $n \to \infty$, όπου

$$S(\sigma) = \int_\sigma pdq - H_c d\tau = \int_t^{t'} (p(\tau)\dot{q}(\tau) - H_c(p(\tau), q(\tau)))d\tau$$

είναι το συναρτησιακό της δράσης ενός κλασικού συστήματος, το οποίο έχει την συγκεκριμένη Χαμιλτονιανή.
Άρα, θα μπορούσαμε να ερμηνεύσουμε την σχέση που προέκυψε για τους πυρήνες ως ολοκλήρωμα στον χώρο $\bar{P}(\mathbb{R}^2)_{q,t}^{q',t'}$ πάνω σε όλα τα μονοπάτια $\sigma(\tau)$ στον επεκταμένο χώρο φάσεων $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$, ώστε $q(t) = q$ και $q(t') = q'$.
Σημειώνουμε ότι το ολοκλήρωμα αυτό χρησιμοποιείται στην διατύπωση της αρχής της ελάχιστης δράσης στην κλασική μηχανική και θα δούμε στη συνέχεια πως ερμηνεύεται αυτό στη φυσική, συγκρίνοντας κλασική μηχανική και κβαντομηχανική.

Επομένως, μπορούμε να γράψουμε την ακόλουθη σχέση :

$$K(q', t'; q, t) = \int_{\bar{P}(\mathbb{R}^2)_{q,t}^{q',t'}} e^{\frac{i}{\hbar} S(\sigma)} \mathcal{D}p \mathcal{D}q \tag{6.10}$$

όπου το « μέτρο » $\mathcal{D}p\mathcal{D}q$ θα δίνεται από την ακόλουθη σχέση :

$$\lim_{n \to \infty} \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \prod_{k=1}^{n-1} \frac{dp_k dq_k}{2\pi\hbar} \tag{6.11}$$

Αυτό είναι το λεγόμενο ολοκλήρωμα κατα μονοπάτια (Path Integral) του Feynman ορισμένο στον χώρο των φάσεων για τον πυρήνα ενός κβαντικού σωματιδίου, το οποίο μας δίνει μια έκφραση του πυρήνα ως σταθμισμένου αθροίσματος πάνω σε όλες τις δυνατές τροχιές που θα μπορούσε να ακολουθήσει το σωματίδιο μας.

Αμέσως παρατηρούμε την αντιδιαστολή με την κλασική μηχανική, όπου εκεί το σωματίδιό μας θα ακολουθήσει μετά βεβαιότητας την κλασική τροχιά ή μονοπάτι, που είναι αυτό που ελαχιστοποιεί το συναρτησιακό της δράσης S, ενώ στην κβαντομηχανική έχουμε συνεισφορά από όλα τα δυνατά μονοπάτια.

Παρατήρηση 6.1.1. *Το (Path Integral) που ορίζει ο Feynman δεν αποτελεί ολοκλήρωμα με την κλασική έννοια του ολοκληρώματος, διότι το $\mathcal{D}p\mathcal{D}q$ δεν ορίζει μέτρο στον χώρο των μονοπατιών $\bar{P}(\mathbb{R}^2)_{q,t}^{q',t'}$. Αυτό γιατί ένα μέτρο οφείλει να είναι μη αρνητικό και σ-αθροιστικό και στην περίπτωση μας αυτά δεν ισχύουν.*

Υπάρχει όμως και μια άλλη μορφή των (Path Integral) , την οποία μάλιστα θα χρησιμοποίσουμε και είναι αυτή στο cofiguration space $\mathbb{R}$. Έχουμε :

$$\begin{aligned} K(q', t'; q, t) &= \lim_{n \to \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{n}{2}} \\ &\times \int \cdots \int_{\mathbb{R}^{n-1}} exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\Delta t} \right)^2 - V(q_k) \right) \Delta t \right) \cdot \prod_{k=1}^{n-1} dq_k \end{aligned}$$

όπου $q_k = q(t_k),\ k = 0, \ldots n$ για κάποιο λείο μονοπάτι $\gamma(\tau) = q(\tau)$ στο $\mathbb{R}$ με $q_0 = q$ και $q_n = q'$. Παίρνουμε το όριο για $n \to \infty$:

$$\sum_{k=0}^{n-1} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\Delta t} \right)^2 - V(q_k) \right) \Delta t = S(\gamma) + \mathcal{O}(1),$$

όπου

$$S(\gamma) = \int_t^{t'} L(\gamma'(\tau))d\tau = \int_t^{t'} L(q(\tau), \dot{q}(\tau))d\tau, \quad L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2}\dot{q}^2 - V(q)$$

Άρα, μπορούμε να ερμηνεύσουμε το πιο πάνω όριο ως το (Path Integral) κατά Feynman στο configuration space :

$$K(q', t'; q, t) = \int_{P(\mathbb{R})_{q,t}^{q',t'}} e^{\frac{i}{\hbar}S(\gamma)} \mathcal{D}q, \tag{6.12}$$

όπου με $P(\mathbb{R})_{q,t}^{q',t'}$ συμβολίζουμε τον χώρο των λείων καμπυλών γ
και το « μέτρο »

$$\mathcal{D}q = \lim_{n \to \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{n}{2}} \cdot \prod_{k=0}^{n-1} dq_k \tag{6.13}$$

Όπως και προηγουμένως, το Path Integral δεν αποτελεί ολοκλήρωμα με την κλασική έννοια και το νόημα του δίνεται από την οριακή σχέση.

Παρατήρηση 6.1.2. *Η συγκλίσεις που έχουμε εδώ είναι με την έννοια των κατανομών. Πιο συγεκριμένα, για κάθε* $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

$$\left(e^{-\frac{i}{\hbar}TH} \psi \right)(q) = \lim_{n \to \infty} \left(\frac{m}{2\pi \hbar i \Delta t} \right)^{\frac{n}{2}}$$

$$\times \int \cdots \int_{\mathbb{R}^n} exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\Delta t} \right)^2 - V(q_k) \right) \Delta t \right) \psi(q_n) \cdot \prod_{k=1}^{n} dq_k$$

Κεφάλαιο 7

Θεώρημα Feynman - Kac

7.1 Kolmogorov's Backward equation

Ας θεωρήσουμε μια διάχυση *Itô* X_t στον $\mathbb{R}^n$, με αντίστοιχο γεννήτορα τελεστή A. Επιλέγουμε μια $f \in C_0^2(\mathbb{R}^n)$, $\tau = t$ και εφαρμόζουμε την φόρμουλα του Dynkin . Παίρνουμε ότι :

$$u(t,x) = E^x[f(X_t)]$$

και παρατηρούμε ότι υπάρχει η χρονική παράγωγος αφού :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = E^x[Af(X_t)]$$

Θεώρημα 7.1.1. *(Kolmogorov's Backward equation)*
Έστω $f \in C_0^2(\mathbb{R}^n)$ και $u(t,x) = E^x[f(X_t)]$. Τότε η συνάρτηση $u(t,\cdot) \in \mathcal{D}_A$ $\forall t \geq 0$ και θα ικανοποιεί το ακόλουθο πρόβλημα αρχικών τιμών :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial u}{\partial t} = Au, && t > 0,\ x \in \mathbb{R}^n \\ &u(0,x) = f(x) && ,x \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

όπου ο τελεστής A δρα πάνω στη συνάρτηση $x \to u(t,x)$ και επιπλέον, αν $w(t,x) \in C^{1,2}(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$ φραγμένη συνάρτηση που να ικανοποιεί το πρόβλημα αρχικών τιμών, τότε :

$$w(t,x) = u(t,x)$$

Απόδειξη: Θέτουμε $g(x) = u(t,x)$. Επειδη υπάρχει η χρονική παράγωγος της u, έχουμε:

$$\begin{aligned}\frac{E^x[g(X_r)]-g(x)}{r} &= \frac{1}{r}\cdot E^x[E^{X_r}[f(X_t)]-E^x[f(X_t)]]\\ &= \frac{1}{r}\cdot E^x[E^x[f(X_{t+r})]|\mathcal{F}_r - E^x[f(X_t)|\mathcal{F}_r]]\\ &= \frac{1}{r}\cdot E^x[f(X_{t+r})-f(X_t)]\\ &= \frac{u(t+r,x)-u(t,x)}{r}\to\frac{\partial u}{\partial t},\ \text{ καθώς } r\to 0\end{aligned}$$

Άρα,

$$Au=\lim_{r\downarrow 0}\frac{E^x[g(X_r)]-g(x)}{r}\ \text{ υπάρχει και είναι ίσο με } \frac{\partial u}{\partial t}$$

Όσο αφορά την μοναδικότητα της λύσης, ας θεωρήσουμε μια $w(t,x)\in C^{1,2}(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n)$ που να ικανοποιεί το πρόβλημα αρχικών τιμών. Τότε θα έχουμε ότι :

$$\begin{aligned}A^*w &= -\frac{\partial w}{\partial t}+Aw=0 && ,t>0,x\in\mathbb{R}^n\\ w(0,x)&=f(x) && ,x\in\mathbb{R}^n\end{aligned}$$

Ας θεωρήσουμε ένα σημείο $(s,x)\in(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n)$. Ορίζουμε την στοχαστική ανέλιξη : (Y_t) στον $\mathbb{R}^{n+1}$ ως εξής:

$$Y_t=(s-t,X_t^{0,x})$$

που έχει ως γεννήτορα τελεστή τον A^*. Άρα από την φόρμουλα του *Dynkin* παίρνουμε ότι $\forall t\geq 0$,

$$E^{s,x}[w(Y_{t\wedge\tau_R})]=w(s,x)+E^{s,x}\left[\int_0^{t\wedge\tau_R}A^*w(Y_r)dr\right]=w(s,x)$$

όπου $\tau_R=inf\{t>0:|X_t|\geq R\}$. Στέλνοντας $R\to\infty$, παίρνουμε

$$w(s,x)=E^{s,x}[w(Y_t)],\ \ \forall t\geq 0$$

Ορισμός 7.1.1. *Έστω $a>0$ και $g\in C_b(\mathbb{R}^n)$. Ορίζουμε τον επιλύοντα τελεστή (resolvent operator) R_a ως εξής:*

$$R_ag(x)=E^x\left[\int_0^\infty e^{-at}g(X_t)dt\right] \tag{7.1}$$

Λήμμα 7.1.1. *Η R_ag είναι φραγμένη και συνεχής. Επειδή*

$$R_ag=\int_0^\infty e^{-at}E^x[g(X_t)]dt$$

το αποτέλεσμα αυτό προκύπτει από το ακόλουθο λήμμα:

Λήμμα 7.1.2. *Έστω g μια κάτω φραγμένη, Borel μετρήσιμη συνάρτηση. Για $t \geq 0$, ορίζουμε :*

$$u(x) = E^x[g(X_t)]$$

(α) Αν g κάτω φραγμένη και κάτω ημισυνεχής, τότε u θα είναι κάτω ημισυνεχής.
(β) Αν g φραγμένη και συνεχής, τότε u θα είναι συνεχής.

Απόδειξη : Χρησιμοποιούμε τον ακόλουθο τύπο που προκύπτει από την ανισότητα *Gronwall*

$$E[|X_t^x - X_t^y|^2] \leq |y-x|^2 C(t)$$

Θεωρούμε μια ακολουθία $\{y_n\}_n$ έτσι ώστε $y_n \to x$. Τότε,

$$X_t^{y_n} \to X_t^x \text{ καθώς } n \to \infty \ (\mathcal{L}^2 \text{ σύγκλιση})$$

Άρα, υπάρχει υπακολουθία $\{z_n\}_n$ της $\{y_n\}_n$ τέτοια ώστε $X_t^{z_n}(\omega) \to X_t^x(\omega)$, σχεδόν για όλα τα $\omega \in \Omega$.
(α) Έστω g κάτω φραγμένη και κάτω ημισυνεχής. Θα κάνουμε χρήση του λήμματος *Fatou* :

$$\begin{aligned} u(x) = E[g(X_t^x)] &\leq E[\liminf_{n\to\infty} g(X_t^{z_n})] \\ &\leq \liminf_{n\to\infty} E[g(X_t^{z_n})] \\ &= \liminf_{n\to\infty} u(z_n) \end{aligned}$$

Άρα, κάθε $y_n \to x$ έχει μια υπακολουθία $\{z_n\}$ τέτοια ώστε $u(x) \leq \liminf_{n\to\infty} u(z_n)$.
(β) Αν τώρα g είναι φραγμένη και συνεχής, εφαρμόζουμε το πιο πάνω για τις συναρτήσεις $g, -g$. Άρα, $u, -u$ είναι κάτω ημισυνεχείς, δηλαδή u είναι συνεχής.

Θα αποδείξουμε τώρα ότι οι R_a και $a - A$ αποτελούν αντίστροφους τελεστές.

Θεώρημα 7.1.2. *(α) Αν $f \in C_0^2(\mathbb{R}^n)$, τότε $R_a(a-A)f = f$, $\forall a > 0$.*
(β) Αν $g \in C_b(\mathbb{R}^n)$, τότε $R_a g \in \mathcal{D}_A$ και επίσης $(a-A)R_a g = g$, $\forall a > 0$.

Απόδειξη : (α) Θα κάνουμε χρήση της φόρμουλας του *Dynkin*. Έστω $f \in C_0^2(\mathbb{R}^n)$. Τότε έχουμε ότι :

$$\begin{aligned} R_a(a-A)f(x) &= (aR_a f - R_a Af)(x) \\ &= a\int_0^\infty e^{-at}E^x[f(X_t)]dt - \int_0^\infty e^{-at}E^x[Af(X_t)]dt \\ &= \Big|_0^\infty - e^{-at}E^x[f(X_t)] + \int_0^\infty e^{-at}\frac{d}{dt}E^x[f(X_t)]dt - \int_0^\infty e^{-at}E^x[Af(X_t)]dt \\ &= E^x[f(X_0)] = f(x) \end{aligned}$$

(β) Θα κάνουμε χρήση της ισχυρής μαρκοβιανής ιδιότητας. Έστω $g \in C_b(\mathbb{R}^n)$. Τότε έχουμε ότι :

$$\begin{aligned} E^x[R_a g(X_t)] &= E^x[E^{X_t}[\int_0^\infty e^{-as} g(X_s)ds]] \\ &= E^x[E^x[\int_0^\infty e^{-as} g(X_{t+s})ds|\mathcal{F}_t]] \\ &= E^x[\int_0^\infty e^{-as} g(X_{t+s})ds] \\ &= \int_0^\infty e^{-as} E^x[g(X_{t+s})]ds \end{aligned}$$

Με παραγοντική ολοκλήρωση παίρνουμε ότι :

$$E^x[R_a g(X_t)] = a \int_0^\infty e^{-as} \int_t^{t+s} E^x[g(X_r)]drds$$

Άρα, $R_a g \in \mathcal{D}_A$ και $A(R_a g) = aR_a g - g$

7.2 Θεώρημα Feynman-Kac

Το θεώρημα Feynman-Kac αποτελεί γενίκευση της Kolmogorov's Backward equation.

Θεώρημα 7.2.1. *Έστω $f \in C_0^2(\mathbb{R}^n)$, $q \in C(\mathbb{R}^n)$, όπου q κάτω φραγμένη.*
(α) Έστω

$$u(t,x) = E^x \left[exp\left(- \int_0^t q(X_s)ds \right) f(X_t) \right]$$

Τότε,

$$\begin{aligned} &\frac{\partial u}{\partial t} = Au - qu \qquad && ,t > 0, x \in \mathbb{R}^n \\ &u(0,x) = f(x) && ,x \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

(β) Εάν $w(t,x) \in C^{1,2}(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$ είναι φραγμένη στο $K \times \mathbb{R}^n$ $\forall K \subset \mathbb{R}$ συμπαγές και είναι λύση του προβλήματος αρχικών τιμών που έχουμε στο (α), τότε

$$w(t,x) = u(t,x)$$

Απόδειξη : (α) Έστω $Y_t = f(X_t)$, $Z_t = exp\left(-\int_0^t q(X_s)ds \right)$. Τότε, χρησιμοποιώντας το λήμμα 4.3.1 παίρνουμε έναν τύπο για το dY_t και από τη φόρμουλα του *Itô* έχουμε ότι :

$$dZ_t = Z_t q(X_t)dt$$

Άρα έχουμε ότι το γινόμενο

$$dY_t \cdot dZ_t = Y_t dZ_t + Z_t dY_t$$

αφού

$$dZ_t \cdot dY_t = 0$$

Επειδή όμως $Y_t \cdot Z_t$ αποτελεί διαδικασία $It\hat{o}$, από το λήμμα 4.3.1 θα έχουμε ότι η

$$u(t,x) = E^x\left[Y_t \cdot Z_t\right]$$

είναι διαφορίσιμη ως προς t. Άρα, η u(t,x) είναι η συνάρτηση που έχουμε στο (α) και θέλουμε να δείξουμε ότι ικανοποιεί το πρόβλημα αρχικών τιμών. Πράγματι,

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{r}\left(E^x[u(t,X_r) - u(t,x)]\right) \\
&= \frac{1}{r}E^x[E^{X_r}[Z_t f(X_t)] - E^x[Z_t f(X_t)]] \\
&= \frac{1}{r}E^x[E^x[f(X_{t+r})exp\left(-\int_0^t q(X_{s+r})ds\right)|\mathcal{F}_r] - E^x[Z_t f(X_t)|\mathcal{F}_r]] \\
&= \frac{1}{r}E^x[Z_{t+r}exp\left(\int_0^r q(X_s)ds\right)f(X_{t+r}) - Z_t f(X_t)] \\
&= \frac{1}{r}E^x[f(X_{t+r})Z_{t+r} - f(X_t)Z_t] + \frac{1}{r}E^x[f(X_{t+r})Z_{t+r}\left(exp\left(\int_0^r q(X_s)ds\right) - 1\right)] \\
&\to \frac{\partial}{\partial t}u(t,x) + q(x)u(t,x)
\end{aligned}$$

αφού

$$\frac{1}{r}f(X_{t+r})Z_{t+r}\left(exp\left(\int_0^r q(X_s)ds\right) - 1\right) \to f(X_t)Z_t \cdot q(X_0)$$

(β) Ας υποθέσουμε ότι η $w(t,x) \in C^{1,2}(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$ ικανοποιεί το πρόβλημα αρχικών τιμών του θεωρήματος και ότι είναι φραγμένη στο $K \times \mathbb{R}^n$, $\forall K \subset \mathbb{R}$ συμπαγές. Τότε,

$$\begin{aligned}
&A^* w(t,x) = -\frac{\partial w}{\partial t} + Aw - qw = 0 \qquad &, t > 0, x \in \mathbb{R}^n \\
&w(0,x) = f(x) \qquad &,, x \in \mathbb{R}^n
\end{aligned}$$

Επιλέγουμε ένα $(s,x,z) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ και ορίζουμε τις στοχαστικές διαδικασίες

$$\begin{aligned}
Z_t &= z + \int_0^t q(X_s)ds \\
H_t &= (s - t, X_t^{0,x}, Z_t)
\end{aligned}$$

Τότε, η H_t αποτελεί διάχυση *Itô* και πιο συγκεκριμένα θα έχει τον εξής γεννήτορα τελεστή :

$$A_H g(s,x,z) = -\frac{\partial g}{\partial s} + Ag + q(x)\frac{\partial g}{\partial z}, \quad g \in C_0^2(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n)$$

Ως εκ τούτου, χρησιμοποιώντας τον ορισμό της A^* αλλά και τη φόρμουλα Dynkin, θα έχουμε ότι $\forall t \geq 0,\ R > 0$ και για

$$g(s,x,z) = exp(-z)w(s,x)$$

$$E^{s,x,z}[g(H_{t\wedge\tau_R})] = g(s,x,z) + E^{s,x,z}\left[\int_0^{t\wedge\tau_R} A_H g(H_r)\right]$$

όπου $\tau_R = inf\{t > 0 : |H_t| \geq R\}$
Για τη συγκεκριμένη επιλογή της g, συνδυάζοντας το πρόβλημα αρχικών τιμών και τον ορισμό της A_H, έχουμε ότι:

$$A_H g(s,x,z) = exp(-z)[A^*w] = 0$$

Άρα,

$$\begin{aligned} w(s,x) = g(s,x,0) &= E^{s,x,0}[g(H_{t\wedge\tau_R})] \\ &= E^x\left[exp\left(-\int_0^{t\wedge\tau_R} q(X_r)dr\right)w(s-t\wedge\tau_R, X_{t\wedge\tau_R})\right] \\ &\to E^x\left[exp\left(-\int_0^t q(X_r)dr\right)w(s-t,X_t)\right] \end{aligned}$$

καθώς $R\to\infty$, αφού $w(r,x)$ είναι φραγμένη για $(r,x)\in K\times\mathbb{R}^n$. Επιλέγοντας $t = s$, παίρνουμε ότι

$$w(s,x) = E^x\left[exp\left(-\int_0^s q(X_r)dr\right)w(0,X_s^{0,x})\right] = u(s,x)$$

7.3 Εφαρμογές του θεωρήματος Feynman-Kac , Αρμονικός Ταλαντωτής

Ας δούμε πρώτα όμως ένα σημαντικό αποτέλεσμα που προκύπτει ως μια εφαρμογή του θεωρήματος, το νόμο του τοξημιτόνου.
Έστω

$$\mu_t = \frac{1}{t}\int_0^t \mathcal{X}_{[0,\infty]}(x(s))ds$$

το ποσοστό του χρόνου όπου η κίνηση Brown $x(s)$ με σημείο εκκίνησης το 0, παίρνει θετικές τιμές. Λόγω της συμμετρικής συμπεριφοράς της κίνησης Brown, γνωρίζουμε ότι $E[\mu_t] = \frac{1}{2}$. Επίσης, όπως έχουμε δεί στο δεύτερο κεφάλαιο της εργασίας αυτής, για θετικό λ, η $x_\lambda(t) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} x(\lambda t)$ αποτελεί επίσης μία κίνηση Brown που ξεκινά από το 0.

$$\mu_t = \int_0^1 \mathcal{X}_{[0,\infty]}(x(ts))ds = \int_0^1 \mathcal{X}_{[0,\infty]}(\sqrt{t} x_t(s))ds = \int_0^1 \mathcal{X}_{[0,\infty]}(x_t(s))ds$$

Παρατηρούμε ότι η μ_t έχει την ίδια κατανομή με την μ_1, $\forall t$.
Θα δείξουμε ότι :

$$P^0[\mu_1 \leq x] = \int_0^x \frac{1}{\pi\sqrt{y(1-y)}} dy = \frac{2}{\pi} arcsin(\sqrt{x})$$

Θέτουμε λοιπόν $V(x) = \mathcal{X}_{[0,\infty)}(x)$ και υπολογίζουμε μέσω της φόρμουλας Feynman-Kac ότι :

$$u(t,\sigma,x) = E^x[exp[-\sigma \int_0^t V(x(s))ds]] \tag{7.2}$$

Το αντίστοιχο πρόβλημα αρχικών τιμών είναι το εξής :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \sigma V u, \;\; u(0,x) = 1$$

Κάνουμε μετασχηματισμό Laplace ως προς t και παίρνουμε :

$$g(\lambda,\sigma,x) = \int_0^\infty u(t,\sigma,x) e^{-\lambda t} dt$$

και η συνάρτηση g θα ικανοποιεί την εξίσωση :

$$\lambda g + \sigma V g - \frac{1}{2}\frac{d^2 g}{dx^2} = 1$$

η οποία μπορεί και να γραφεί με τον εξής τρόπο :

$$(\lambda+\sigma)g - \frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} g = 1, \;\; x > 0$$
$$\lambda g - \frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} g = 1, \;\; x < 0$$

Υπάρχουν συνθήκες στο άπειρο που εξασφαλίζουν ότι η g θα είναι φραγμένη και συνθήκες προσαρμογής στο 0, έτσι ώστε να εξασφαλίζεται ότι η g θα είναι συνεχώς παραγωγίσιμη. Η γενική λύση των εξισώσεων αυτών δίνεται από τις παρακάτω σχέσεις :

$$g(\lambda,\sigma,x) = \frac{1}{\lambda+\sigma} + Ae^{\sqrt{2(\lambda+\sigma)}x} + Be^{-\sqrt{2(\lambda+\sigma)}x}, \;\; x > 0$$
$$g(\lambda,\sigma,x) = \frac{1}{\lambda} + Ce^{\sqrt{2\lambda}x} + De^{-\sqrt{2\lambda}x}, \;\; x < 0$$

Λόγω των συνθηκών που έχουμε αναφέρει, $A = D = 0$ και

$$g(\lambda, \sigma, 0) = \frac{1}{\lambda + \sigma} + B = \frac{1}{\lambda} + C = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \frac{1}{\sqrt{\lambda + \sigma}}$$

Ταυτόχρονα έχουμε και το εξής :

$$\begin{aligned} g(\lambda, \sigma, 0) &= E^0 \left[\int_0^\infty exp[-\lambda t - \sigma \int_0^t V(x(s)) ds] dt \right] \\ &= E^0 \left[\int_0^\infty exp[-\lambda t - \sigma t \mu_1] dt \right] \\ &= E^0 \left[\frac{1}{\lambda + \sigma \mu_1} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \frac{1}{\sqrt{\lambda + \sigma}} \end{aligned}$$

Θέτουμε $\lambda = 1$ και για την κατανομή της τ.μ $\mu = \mu_1$ ως προς το μέτρο P^0 έχουμε :

$$E \left[\frac{1}{1 + \sigma \mu_1} \right] = \frac{1}{\sqrt{1 + \sigma}}$$

Αναπτύσσοντας τα δύο μέλη σε δυνάμεις του σ και εξισώνοντας τους συντελεστές, παίρνουμε ότι :

$$\begin{aligned} E[\mu^n] = \frac{\frac{1}{2}\frac{3}{2} \ldots \frac{2n-1}{2}}{n!} &= \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma(\frac{2n+1}{2}) \Gamma(\frac{1}{2})}{\Gamma(n+1)} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^1 x^{n - \frac{1}{2}} (1 - x)^{-\frac{1}{2}} dx \\ &= \int_0^1 x^n p(x) dx, \quad p(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x(1-x)}} \end{aligned}$$

Άρα, έχουμε εντοπίσει την κατανομή της μ και επομένως έχουμε δείξει το νόμο του τοξημιτόνου.

Θα θέλαμε να εφαρμόσουμε το θεώρημα Feynman-Kac για την περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή, με κάποια αρχική συνθήκη. Για λόγους απλότητας, ας υποθέσουμε ότι έχουμε την αδιάστατη εξίσωση του Shrödinger :

$$i \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \triangle u(x,t) + V(x,t) u(x,t)$$

Για να μπορέσουμε να πάρουμε την λύση της εξίσωσης αυτής από το θεώρημα, χρειάζεται ένα επιχείρημα από τη μιγαδική ανάλυση. Θα κάνουμε χρήση του ευκλείδιου χρόνου, δηλαδή θα κάνουμε ένα μετασχηματισμό $t \to it$ και λόγω αναλυτικής συνέχειας, παίρνουμε την εξής σχέση :

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \triangle u(x,t) - V(x,t)u(x,t) \tag{7.3}$$

η οποία είναι γνωστή ως η εξίσωση του Bloch . Έτσι, το πρόβλημα μας ανάγεται σε μια εφαρμογή του θεωρήματος Feynman-Kac , όπου θέτουμε $V(x) = \frac{x^2}{2}$ και $u(x,0) = 1$.
Από το θεώρημα θα πάρουμε την εξής σχέση :

$$u(x,t) = E^x[1 \cdot exp[-\frac{1}{2}\int_0^t B_s^2 ds]], \tag{7.4}$$

όπου το ολοκλήρωμα Riemann έχει νόημα αν, για σταθερό ω, θεώρήσουμε ένα μονοπάτι της κίνησης Brown $\beta(s) = f(s,\omega)$.

Ας επιστρέψουμε όμως στην περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή.

Έστω ότι το δυναμικό είναι $V(x) = x^2$. Τότε, από το θεώρημα Feynman-Kac έχουμε ότι αν

$$u(t,x) = E^x\left[exp[-\int_0^t (x(s))^2 ds]\right],$$

τότε το αντίστοιχο πρόβλημα αρχικών τιμών θα είναι το ακόλουθο :

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

Θα προσπαθήσουμε να εντοπίσουμε λύση της μορφής $u(t,x) = exp(v(t,x))$, όπου $v(t,x) = a(t) + b(t)x^2$, διότι υποπτευόμαστε την ύπαρξη τετραγωνικών μορφών στον εκθέτη και ασχολούμαστε με άρτιες συναρτήσεις. Εαν αντικαταστήσουμε στην διαφορική εξίσωση παίρνουμε το εξής :

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{1}{2}[\frac{\partial v}{\partial x}]^2 - x^2$$

Εξισώνοντας τους συντελεστές των $1, x^2$ παίρνουμε δύο συνήθεις διαφορικές εξισώσεις :

$$\frac{db}{dt} = 2b^2 - 1$$
$$\frac{da}{dt} = b, \quad a(0) = b(0) = 0$$

Μπορούμε τώρα να λύσουμε το σύστημα αυτό και παίρνουμε :

$$b(t) = -\frac{1}{\sqrt{2}} tanh(\sqrt{2}t)$$
$$a(t) = -log(cosh(\sqrt{2}t))$$

Επομένως, αν επανέλθουμε στην αναπαράσταση για την u έχουμε το εξής αποτέλεσμα :

$$u(t,0) = E^0 \left[exp[-\int_0^t (x(s))^2 ds] \right] = exp[a(t)] = \frac{1}{\sqrt{cosh(\sqrt{2}t)}} \tag{7.5}$$

7.4 Συσχετισμός Path Integral με το θεώρημα Feynman - Kac

Ένας από τους στόχους αυτής της εργασίας είναι να δούμε πως συσχετίζονται η θεωρία των στοχαστικών ανελίξεων με τα ολοκληρώματα κατά μονοπάτια του Feynman . Για να το κάνουμε αυτό, θα πρέπει να δούμε πως ορίζεται το **μέτρο Wiener** .
Θα θέλαμε να ορίσουμε το μέτρο αυτό στον χώρο των παραμετρικοποιημένων συνεχών μονοπατιών, που ξεκινούν από το 0 :

$$\mathcal{C} = C([0,\infty), \mathbb{R}^n; 0)$$

Η πυκνότητα πιθανότητας για μια διάχυση Brown με σταθερά διάχυσης $D > 0$ δίνεται από την εξής φόρμουλα :

$$P(q', q; t) = (4\pi Dt)^{-\frac{n}{2}} exp(-\frac{(q-q')^2}{4Dt})$$

και περιγράφει το ενδεχόμενο ένα σωματίδιο που ξεκινά από ένα σημείο q, να βρεθεί μετά από χρόνο t στο σημείο q'.
Θα χρειαστούμε παράλληλα να συμπαγοποιήσουμε τον χώρο $\mathbb{R}^n$ προσθέτοντας ένα σημείο στο άπειρο:

$$\hat{\mathbb{R}^n} = \mathbb{R}^n \cup \{\infty\}$$

Επίσης θέτουμε

$$\Omega = \prod_{0 \le t < \infty} \hat{\mathbb{R}^n}$$

το καρτεσιανό γινόμενο « αντιγράφων » του $\hat{\mathbb{R}^n}$ που παραμετρικοποιούνται από τον $\mathbb{R}_{\geq 0}$. Εφοδιασμένος με την τοπολογία Tychonoff , ο Ω θα είναι συμπαγής τοπολογικός χώρος και αποτελεί ουσιαστικά των χώρο όλων των παραμετρικοποιημένων μονοπατιών του $\hat{\mathbb{R}^n}$. Για κάθε διαμέριση $\{0 \leq t_1 \leq \cdots \leq t_m\}$ και συνάρτηση $F \in C(\hat{\mathbb{R}^n} \times \cdots \times \hat{\mathbb{R}^n})$, ορίζουμε $\phi \in C(\Omega)$ ως εξής :

$$\phi(\gamma) = F(\gamma(t_1), \dots \gamma(t_m)), \ \ \forall \gamma \in \Omega$$

Συμβολίζουμε με $C_{fin}(\Omega)$ τον υπόχωρο του $C(\Omega)$ που παράγεται από τις συναρτήσεις φ για οποιαδήποτε διαμέριση και συνεχή συνάρτηση F.
Ορίζουμε το γραμμικό συναρτησιακό $l : C_{fin}(\Omega) \to \mathbb{R}$ ως εξής :

$$l(\phi) = \int_{\mathbb{R}^n} \cdots \int_{\mathbb{R}^n} F(q_1, \dots q_m) P(q_m, q_{m-1}; t_m - t_{m-1}) \dots P(q_1, 0; t_1) d^n q_1 \dots d^n q_m \tag{7.6}$$

Προκύπτει από την ιδιότητα της ημιομάδας (που λέγεται και εξίσωση του Kolmogorov στην θεωρία πιθανοτήτων) ότι :

$$\int_{\mathbb{R}^n} P(q', q_1, t' - t_1) P(q_1, q; t_1 - t) d^n q_1 = P(q', q; t' - t) \tag{7.7}$$

και άρα το συναρτησιακό θα είναι καλώς ορισμένο. Επιπλέον, το συνατησιακό που μόλις ορίσαμε είναι θετικό, αφού $l(\phi) \geq 0$ για $\phi \geq 0$, $l(1) = 1$ και

$$|l(\phi)| \leq \|\phi\|_\infty = \sup_{\gamma \in \Omega} |\phi(\gamma)|$$

Ο υπόχωρος $C_{fin}(\Omega)$ διαχωρίζει σημεία στον Ω και την συνάρτηση $1 \in C_{fin}(\Omega)$ και άρα, από το θεώρημα Stone-Weierstrass ο $C_{fin}(\Omega)$ είναι πυκνός υπόχωρος του $C(\Omega)$. Τώρα, από το θεώρημα Hahn Banach θα υπάρχει μοναδική γραμμική και θετική επέκταση του συναρτησιακού μας στον χώρο $C(\Omega)$. Επιπλέον, από το θεώρημα Riesz-Markoff , υπάρχει μοναδικό κανονικό μέτρο Borel μ_W στον Ω με $\mu_W(\Omega) = 1$, τέτοιο ώστε

$$l(\phi) = \int_\Omega \phi d\mu_W \tag{7.8}$$

Το μέτρο αυτό καλείται μέτρο Wiener και το ολοκλήρωμα Lebesgue που ορίζει καλείται ολοκλήρωμα Wiener .

Παρατήρηση 7.4.1. *Το θεώρημα Riesz-Markoff παρέχει ένα φυσικό τρόπο για να οριστούν μέτρα σε διάφορες εφαρμογές της συναρτησιακής ανάλυσης. Γενικά, εγγυάται την ύπαρξη ενός μέτρου Baire , δηλαδή μέτρου ορισμένου στην σ-άλγεβρα Baire . Παρ' όλα αυτά, σε συμπαγής χώρους ένα μέτρο Baire έχει μοναδική επέκταση σε ένα κανονικό μέτρο Borel . (Που είναι ουσιαστικά η σ-άλγεβρα που παράγεται από την κλάση των ανοικτών συνόλων).*

Πρόταση 7.4.1. *Το μέτρο Wiener έχει ώς φορέα τον χώρο των συνεχών μονοπατιών που ξεκινούν από το 0, δηλαδή* $\mu_W(\mathcal{C}) = 1$.

Παρατήρηση 7.4.2. *Μπορεί κανείς, αντικαθιστώντας την πυκνότητα πιθανότητας* $P(q_1, 0; t_1)$ *με* $P(q_1, q_0; t_1)$, *για σταθερό* $q_0 \in \mathbb{R}^n$, *να πάρει ένα μέτρο Wiener* μ_{q_0}, *του οποίου ο φορέας είναι, όπως θα αναμέναμε, ο χώρος των συνεχών μονοπατιών του* $\mathbb{R}^n$ *που ξεκινούν από το σημείο* q_0:

$$\mathcal{C}_{q_0} = C([0, \infty), \mathbb{R}^n; q_0)$$

Θα ακολουθήσει μια πρόταση που θα χρησιμοποιήσουμε για να αναπαραστήσουμε τον ολοκληρωτικό πυρήνα της μονοπαραμετρικής ομάδας τελεστών $e^{-\frac{i}{\hbar}tH}$,για $t > 0$, από το ολοκήρωμα Wiener .

Πρόταση 7.4.2. *Έστω η κάτω φραγμένη, πραγματική συνάρτηση δυναμικού* $V \in C(\mathbb{R}^n)$. *Τότε, για κάθε* $t \geq 0$, *η συνάρτηση* $F_t : \mathcal{C} \to \mathbb{R}$ *που ορίζεται ως εξής :*

$$F(\gamma) = e^{-\int_0^t V(\gamma(\tau))d\tau}$$

είναι ολοκληρώσιμη ως προς το μέτρο Wiener και ισχύει η εξής σχέση :

$$\int_{\mathcal{C}} F_t d\mu_W = \lim_{N\to\infty} \int_{\mathbb{R}^n} \cdots \int_{\mathbb{R}^n} exp\left\{-\sum_{k=1}^{N} V(q_k)\Delta t\right\} P(q_N, q_{N-1}; \Delta t) \ldots$$
$$\ldots P(q_1, 0; \Delta t) d^n q_1 \ldots d^n q_N, \quad \Delta t = \frac{t}{N}$$

Απόδειξη : Για $\gamma \in \mathcal{C}$, από τον ορισμό του ολοκληρώματος Riemann έχουμε

$$\int_0^t V(\gamma(\tau))d\tau = \lim_{N\to\infty} \sum_{k=1}^{N} V(\gamma(t_k))\Delta t,$$

όπου $t_k = k\Delta t$. Εξ' ορισμού, κάθε συνάρτηση $\sum_{k=1}^{N} V(\gamma(t_k))\Delta t$ είναι μετρήσιμη ως προς το μέτρο Wiener στην $\mathcal{C}$, η συνάρτηση F_t θα είναι και αυτή μετρήσιμη ως κατα σημείο όριο μιας ακολουθίας μετρήσιμων συναρτήσεων. Επιπλέον, η F_t είναι φραγμένη και επομένως, θα είναι ολοκληρώσιμη στην $\mathcal{C}$, ως προς το μέτρο Wiener . Τέλος, χρησιμοποιώντας το θεώρημα κυριαρχημένης σύγκλισης, παίρνουμε την σχέση :

$$\int_{\mathcal{C}} F_t d\mu_W = \lim_{N\to\infty} \int_{\mathcal{C}} exp\left\{-\sum_{k=1}^{N} V(\gamma(t_k))\Delta t\right\} d\mu_W(\gamma), \tag{7.9}$$

και επομένως το ζητούμενο αποτέλεσμα προκύπτει από τον ορισμό του συναρτησιακού l.

Θα συνεχίσουμε ορίζοντας το δεσμευμένο μέτρο Wiener . Έστω

$$\Omega_{q,q'} = \left\{ \gamma \in \prod_{t \leq \tau \leq t'} \hat{\mathbb{R}^n} : \gamma(t) = q,\ \gamma(t') = q' \right\}$$

ο χώρος των παραμετρικοποιημένων μονοπατιών του $\hat{\mathbb{R}^n}$ που ξεκινούν από το $q \in \mathbb{R}^n$ την χρονική στιγμή t και έχουν ως τελικό σημείο το $q' \in \mathbb{R}^n$. Θέτουμε με $\mathcal{C}_{q,q'}$ τον αντίστοιχο υπόχωρο των συνεχών μονοπατιών. Το δεσμευμένο μέτρο Wiener ορίζεται με παρόμοιο τρόπο όπως προηγουμένως. Έτσι, παίρνουμε την σχέση:

$$l_{q,q'}(\phi) = \int_{\Omega_{q,q'}} \phi d\mu_{q,q'}$$

Όπως και προηγουμένως, το δεσμευμένο μέτρο Wiener έχει ως φορέα τα συνεχή μονοπάτια και θα ικανοποιείται η σχέση :

$$\mu_{q,q'}(\mathcal{C}_{q,q'}) = P(q', q; t' - t)$$

Ας δούμε τώρα πως όλα αυτά συνδέονται με το θεώρημα Feynman-Kac . Έστω

$$H = H_0 + V = \frac{P^2}{2m} + V(Q)$$

ο τελεστής Shrödinger στον χώρο $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n, d^n q)$, όπου το δυναμικό είναι συνεχές, πραγματικό και κάτω φραγμένο. Θα συμβολίσουμε με $L_\hbar(q', t'; q, t),\ t' > t$ τον πυρήνα θερμότητας, δηλαδή τον ολοκληρωτικό πυρήνα του τελεστή διάχυσης $e^{-\frac{t'-t}{\hbar} H}$. Τότε έχουμε το ακόλουθο αποτέλεσμα :

Θεώρημα 7.4.1. *Φόρμουλα Feynman-Kac*

$$L_\hbar(q', t'; q, t) = \int_{\mathcal{C}_{q,q'}} exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_t^{t'} V(\gamma(\tau)) d\tau \right) d\mu_{q,q'}(\gamma) \tag{7.10}$$

Απόδειξη : Από το θεώρημα Lie-Kato-Trotter έχουμε την εξής σχέση :

$$e^{-\frac{1}{\hbar} TH} = \lim_{N \to \infty} (e^{-\frac{\Delta t}{\hbar} H_0} e^{-\frac{\Delta t}{\hbar} V})^N, \quad \Delta t = \frac{T}{N}$$

όπου $T = t' - t$. Θέτουμε $L_\hbar^{(N)}(q', t'; q, t)$ να είναι ο πυρήνας του τελεστή $(e^{-\frac{\Delta t}{\hbar} H_0} e^{-\frac{\Delta t}{\hbar} V})^N$. Ακολουθούμε τα ίδια βήματα με προηγουμένως, όταν είδαμε πως ορίζεται το Path Integral και χρησιμοποιώντας επιπλέον τον ορισμό του δεσμευμένου μέτρου Wiener παίρνουμε το εξής :

$$L_\hbar^{(N)}(q', t'; q, t) = \int_{\mathcal{C}_{q,q'}} exp\left(-\frac{1}{\hbar} \sum_{k=1}^{N} V(\gamma(t_k)) \Delta t \right) d\mu_{q,q'}(\gamma)$$

Υπολογίζουμε το όριο για $N \to \infty$ και εφαμόζουμε το θεώρημα κυριαρχημένης σύγκλισης του Lebesgue , για να πάρουμε το ζητούμενο αποτέλεσμα.

Προχωρόντας, θα θέλαμε να δούμε πως αυτή η φόρμουλα μπορεί να εφαρμστεί στην πράξη για να πάρουμε το θεώρημα του Feynman-Kac , όπως το είδαμε στη θεωρία των στοχαστικών διαφορικών εξισώσεων. Προκύπτει άμεσα από την πιο πάνω φόρμουλα ότι η δράση του πυρήνα θερμότητας σε μια $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ είναι η εξής :

$$\left(e^{-\frac{1}{\hbar}T(H_0+V)}\psi\right)(q) = \int_{\mathcal{C}_q} \psi(\gamma(T))e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^T V(\gamma(t))dt} d\mu_q(\gamma) \tag{7.11}$$

που είναι ακριβώς το αποτέλεσμα που πήραμε όταν είδαμε το θεώρημα Feynman-Kac από στην σκοπιά των στοχαστικών ανελίξεων. *Ποιος είναι όμως ο συσχετισμός μεταξύ των ολοκληρωμάτων Feynman και Wiener ;*

Υποθέτουμε ότι έχουμε ένα πραγματικό δυναμικό $V(q) \in C(\mathbb{R}^n)$. Χρησιμοποιώντας την φόρμουλα των Lie-Kato-Trotter , εύκολα παρατηρούμε ότι ο πυρήνας θερμότητας $L_\hbar(q', t'; q, t)$ που ορίζεται για $\hbar > 0$, δέχεται αναλυτική συνέχεια στο μιγαδικό ημιεπίεδο $Re\ \hbar > 0$. Προκύπτει άμεσα ότι

$$K_\hbar(q', t'; q, t) = \lim_{\epsilon \to 0^+} L_{i\hbar+\epsilon}(q', t'; q, t) \tag{7.12}$$

Κεφάλαιο 8

Φυσική ερμηνεία των Path Integrals

Σε αυτό το κεφάλαιο θα ασχοληθούμε κυρίως με τη φυσική ερμηνεία των Path Integrals και τη σύγκριση της κλασικής μηχανικής με την κβαντομηχανική.

Ας θεωρήσουμε ένα σωματίδιο που κινείται μεταξύ δύο σημείων x_a και x_b, όπου $x(t_a) = x_a$ και $x(t_b) = x_b$. Με την προσέγγιση του Feynamn , το Path Integral $K(b, a)$ θα συμβολίζει ένα σταθμισμένο άθροισμα πάνω σε όλες τις δυνατές τροχιές που μπορεί να ακολουθήσει ένα κβαντικό σωματίδιο. Δηλαδή, έχουμε συνεισφορά από όλες τις δυνατές τροχιές. Ενώ στην κλασική μηχανική, γνωρίζουμε ότι το μονοπάτι από το x_a στο x_b είναι μοναδικό και θα το συμβολίζουμε με $\bar{x}(t)$.

Πιο συγκεκριμένα, η αρχή της ελάχιστης δράσης μας λέει ότι η ελαχιστοποίηση του συναρτησιακού της δράσης :

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t)dt, \tag{8.1}$$

που ορίζεται πάνω σε όλα τα μονοπάτια $x(t)$, όπου L η Lagrangian του συστήματος, θα μας δώσει το κλασικό μονοπάτι $\bar{x}(t)$.

Επανερχόμαστε στην κβαντομηχανική. Αν το σωματίδιο μας έχει μάζα m και υπόκειται σε δυναμικό $V(x, t)$, τότε η Lagrangian θα υπολογίζεται από την εξής σχέση :

$$L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x, t) \tag{8.2}$$

Πόσο όμως συνεισφέρει κάθε μονοπάτι στο $K(b, a)$;
Σε αντίθεση με την κλασική μηχανική όπου έχουμε ένα μοναδικό μονοπάτι, στην κβαντομηχανική όλα θα συνεισφέρουν κατά ένα παράγοντα $\phi(x(t))$ και οι

παράγοντες αυτοί « αθροίζονται » μέσω του Path Integral .

Έχουμε δεί τον ορισμό των Path Integrals στο προηγούμενο κεφάλαιο. Ένας εναλλακτικός τρόπος να συμβολίσουμε το ολοκλήρωμα είναι ο ακόλουθος

$$K(b,a) = \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar}S[b,a]}\mathcal{D}x(t) \tag{8.3}$$

Διαδοχικά γεγονότα

Έστω οι χρόνοι $t_a < t_c < t_b$. Τότε, παρατηρούμε ότι :

$$S[b,a] = S[b,c] + S[c,a],$$

που προκύπτει από την γραμμικότητα του ολοκληρώματος Riemann . Επομένως, θα έχουμε την ακόλουθη γραφή για το Path Integral :

$$K(b,a) = \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar}S[b,c]+\frac{i}{\hbar}S[c,a]}\mathcal{D}x(t) \tag{8.4}$$

Το συμπέρασμα μας είναι ότι μπορούμε να σπάσουμε οποιοδήποτε μονοπάτι με αρχή το a και τέλος το b σε δύο μέρη, επιλέγοντας ένα αυθαίρετο ενδιάμεσο σημείο c. Αν ολοκληρώσουμε πάνω σε όλα τα μονοπάτια από το a στο c, στη συνέχεια πάνω σε όλα τα μονοπάτια από το c στο b και τελικά, πάνω σε όλες τις επιλογές των x_c, θα πάρουμε :

$$K(b,a) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_c^b e^{\frac{i}{\hbar}S[b,c]}K(c,a)\mathcal{D}x(t)dx_c \tag{8.5}$$

ή ισοδύναμα,

$$K(b,a) = \int_{-\infty}^{\infty} K(b,c)K(c,a)dx_c \tag{8.6}$$

Άρα, προκύπτουν οι εξής κανονές: Τα πλάτη $K(b,a)$ για διαδοχικά συμβάντα πολλαπλασιάζονται και για διαφορετικά μονοπάτια προστίθενται. Εφαρμόζοντας την ιδέα αυτή, μπορούμε να διαμερίσουμε ένα οποιοδήποτε χρονικό διάστημα σε N διαστήματα και τότε παίρνουμε το ακόλουθο αποτέλεσμα :

$$K(b,a) = \int_{x_{n-1}}\cdots\int_{x_2}\int_{x_1} K(b,x_{n-1})\cdot K(x_{n-1},x_{n-2})\ldots K(x_1,a)dx_1\ldots dx_{n-1} \tag{8.7}$$

Κυματοσυναρτήσεις

Θα θέλαμε να εκφράσουμε το πλάτος K για ένα σωματίδιο που θα φτάσει σε κάποιο σημείο (x,t), χωρίς να μας ενδιαφέρει απαραίτητα το σημείο εκκίνησης του. Γνωρίζουμε ότι μια κυματοσυνάρτηση ψ έχει την ιδιότητα ότι :

$$|\psi(x,t)|^2 \text{ μας δίνει την πιθανότητα το σωματίδιο να βρεθεί στην θέση } (x,t)$$

Επιπλέον, από την ανάλυση στο προηγούμενο κεφάλαιο, έχουμε την εξής σχέση που συνδέει κυματοσυναρτήσεις και πλάτη :

$$\psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_b, t_b; x_c, t_)\psi(x_c, t_c)dx_c$$

Επομένως, όλη η πληροφορία για την κίνηση του σωματιδίου στο παρελθόν μπορεί να εκφραστεί από μια συνάρτηση και να κάνουμε υπολογισμούς, χωρίς να μας ενδιαφέρει τι έχει συμβεί στο παρελθόν, αν γνωρίζουμε την κυματοσυνάρτηση σε ένα σημείο (x, t).

Ολοκληρώματα Gauss

Θέλουμε να αναπτύξουμε κάποιες μεθόδους για να μας βοηθήσουν να υπολογίζουμε τα πλάτη K, όταν πληρούνται κάποιες προϋποθέσεις.

Ας θεωρήσουμε λοιπόν ένα κβαντικό σωματίδιο με την ακόλουθη Lagrangian :

$$L(\dot{x}, x, t) = a(t)\dot{x}^2 + b(t)\dot{x}x + c(t)x^2 + d(t)\dot{x} + e(t)x + f(t) \tag{8.8}$$

Πως θα μπορούσαμε να υπολογίσουμε το Path Integral ή αλλιώς πλάτος ;
Έστω $\bar{x}(t)$ το κλασικό μονοπάτι από το a στο b, το οποίο αποτελεί ακρότατο για την

$$S_{cl}[b, a] = S[\bar{x}(t)]$$

Μπορούμε να γράψουμε το κλασικό μονοπάτι ως εξής:

$$x(t) = \bar{x}(t) + y(t), \;\; \text{με } y(t_a) = y(t_b) = 0 \tag{8.9}$$

Κρατώντας σταθερό τον χρόνο t, τα μονοπάτια x, y διαφέρουν κατά μια σταθερά $\bar{x}$.
Επομένως, $dx_i = dy_i \forall t_i \in [t_a, t_b] \; \Rightarrow \mathcal{D}x(t) = \mathcal{D}y(t)$
,δηλαδή τα «μέτρα» αυτά ταυτίζονται. Παρατηρούμε ότι με τον τρόπο που ορίσαμε την $y(t)$, αποτελεί την διαταραχή του μονοπατιού $x(t)$ από το κλασικό μονοπάτι. Αναπτύσσουμε το συναρτησιακό S

$$S[x(t)] = S[\bar{x}(t) + y(t)] = \int_{t_a}^{t_b} [a(t)(\dot{\bar{x}}^2 + 2\dot{\bar{x}}y + \dot{y}^2) + \ldots]dt \tag{8.10}$$

και παρατηρούμε ότι όσοι όροι δεν περιέχουν το y, θα μας δώσουν το $S_{cl} = S[\bar{x}(t)]$, ενώ όσοι όροι περιέχουν το y σε πρώτη τάξη, θα μας δώσουν μηδενικό ολοκλήρωμα. Άρα,

$$S[x(t)] = S_{cl}[b, a] + \int_{t_a}^{t_b} [a(t)\dot{y}^2 + b(t)y\dot{y} + c(t)y^2]dt \tag{8.11}$$

Άρα, το τελικό αποτέλεσμα παίρνει την ακόλουθη μορφή :

$$K(b,a) = e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}[b,a]} \int_0^0 exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}[a(t)\dot{y}^2 + b(t)y\dot{y} + c(t)y^2]dt\right]\mathcal{D}y(t) \quad (8.12)$$

,αφού το $y(t)$ έχει ως αρχικό και τελικό σημείο το 0. Από την εξίσωση αυτή αντιλαμβανόμαστε ότι το πλάτος K παίρνει την ακόλουθη μορφή :

$$K(b,a) = e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}[b,a]}F(t_b,t_a), \quad (8.13)$$

αφού το μόνο απροσδιόριστο που έχουμε στο ολοκλήρωμα είναι μια συνάρτηση των t_b, t_a.

Θα δούμε τώρα μια εφαρμογή των πιο πάνω στην κίνηση ενός κβαντικού σωματιδίου μέσα σε δυναμικό.

Ας θεωρήσουμε αρχικά την περίπτωση του κλασικού ορίου. Κάνουμε πάλι την ανάλυση για το μονοπάτι :

$$x(t) = \bar{x}(t) + y(t), \text{ με } y(t_a) = y(t_b) = 0$$

και επειδή είμαστε στο κλασικό όριο, περιμένουμε ότι το $y(t)$, που αναπαριστά την διαταραχή από το κλασικό μονοπάτι, να είναι πολύ μικρό. Κάνουμε ανάπτυγμα Taylor ως προς την διαταραχή για το δυναμικό. Έχουμε

$$V(x) = V(\bar{x}+y) = V(\bar{x}) + yV'(\bar{x}) + \frac{y^2}{2}V''(\bar{x}) + \mathcal{O}(3)$$

και επειδή μας ενδιαφέρουν μικρές τιμές για το y, θα κρατήσουμε όρους δεύτερης τάξης και κάτω. Επειδή το $\bar{x}$ είναι ακρότατο για το συναρτησιακό της δράσης S, θα έχουμε

$$S = S_{cl} + \text{ όροι δεύτερης τάξης ως προς } y$$

Άρα, στο αποτέλεσμα που θα πάρουμε για το K, ο σημαντικός όρος θα είναι το $e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}[b,a]}$ που είναι υπολογισμένο πάνω στο κλασικό μονοπάτι.
Το υπόλοιπο ολοκλήρωμα θα είναι, όπως είδαμε προηγουμένως, ένα γινόμενο μιας ομαλής συνάρτησης F με τον όρο $e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}[b,a]}$.

Το αποτέλεσμα όμως αυτό δεν είναι μια ειδική περίπτωση του κλασικού ορίου. Μάλιστα, για κάθε συνάρτηση δυναμικού που έχει τετραγωνική μορφή, ισχύει το ίδιο αποτέλεσμα.

Συνεχίζοντας, για να υπολογίσουμε με περισσότερη ακρίβεια ένα Path Integral , χρησιμοποιούμε τον εξής τύπο :

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0, \tag{8.14}$$

ο οποίος αποτελεί μια εξίσωση αντίστοιχη αυτής του δεύτερου νόμου του Νεύτωνα και μας δίνει το κλασικό μονοπάτι $\bar{x}(t)$. Επομένως, μπορούμε με αυτό τον τρόπο να υπολογίσουμε το $S_{cl}[b,a]$ και στη συνέχεια, να υπολογίσουμε τα Path Integrals για μια πληθώρα προβλημάτων όπου το δυναμικό είναι σε τετραγωνική μορφή, όπου ο μόνος άγνωστος είναι μια ομαλή συνάρτηση $F(t_b, t_a)$.

Το πρόβλημα που μας ενδιαφέρει ιδιαιτέρως είναι αυτό του αρμονικού ταλαντωτή, του οποίου το δυναμικό έχει την παρακάτω μορφη (στην 1 διάσταση)

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 \tag{8.15}$$

Επομένως είναι μια τετραγωνική μορφή και θα εφαρμόσουμε τα πιο πάνω. Έχουμε :

$$L = m\frac{\dot{x}^2}{2} - \frac{m\omega^2}{2}x^2 \tag{8.16}$$

και με βάση την σχέση 8.14, προκύπτει ότι το κλασικό μονοπάτι $\bar{x}(t)$ θα ικανοποιεί την :

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \tag{8.17}$$

κάτι που αναμένουμε αφού είναι η περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή στην κλασική μηχανική.
Έχοντας τώρα τις αρχικές συνθήκες $x(t_a) = x_a$ και $x(t_b) = x_b$ μπορεί κανείς να υπολογίσει την συνάρτηση $\bar{x}(t)$ και ακολούθως την ποσότητα :

$$e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}[b,a]} = exp\left(\frac{im\omega}{2\hbar\sin(\omega T)}\left[(x_b^2 + x_a^2)\cos(\omega T) - 2x_b x_a\right]\right)$$

Άρα, το Path Integral για τον αρμονικό ταλαντωτή θα έχει την εξής μορφή :

$$K = F(T)\cdot exp\left(\frac{im\omega}{2\hbar\sin(\omega T)}\left[(x_b^2 + x_a^2)\cos(\omega T) - 2x_b x_a\right]\right), \;\; T = t_b - t_a \tag{8.18}$$

Έχουμε ακόμη την απροσδιόριστη συνάρτηση $F(T)$. Υπάρχουν διάφοροι τρόποι να την υπολογίσει κανείς, π.χ. με την χρήση σειρών Fourier και για τον αρμονικό ταλαντωτή έχουμε ότι :

$$F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega T)}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Πως αλλιώς θα μπορούσαμε όμως να υπολογίσουμε τέτοιου τύπου ολοκληρώματα (Path Integrals); Όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, ένα Path Integral είναι ένα $\mathcal{L}^2$ όριο από γινόμενα ολοκληρωμάτων. Αν τα ολοκληρώματα αυτά μπορούν να υπολογιστούν επακριβώς για κάθε $n \in \mathbb{N}$, τότε υπάρχει ένας απλός τρόπος για να υπολογίσουμε το αντίστοιχο Path Integral . (Η διαδικασία λέγεται ολοκλήρωση Gauss)

Λήμμα 8.0.1. *Έστω A ένας θετικά ορισμένος $n \times n$ πίνακας, πραγματικός και συμμετρικός. Τότε, ισχύει η ακόλουθη σχέση :*

$$\int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{1}{2}(Aq,q)+(p,q)} d^n q = \frac{\sqrt{(2\pi)^n}}{\sqrt{det(A)}} e^{\frac{1}{2}(A^{-1}p,p)}, \tag{8.19}$$

όπου το εσωτερικό γινόμενο είναι το ευκλείδιο εσωτερικό γινόμενο του $\mathbb{R}^n$

Πόρισμα 8.0.1. *Αν ο A είναι ένας πραγματικός, non-degenerate συμμετρικός πίνακας $n \times n$, τότε :*

$$\int_{\mathbb{R}^n} e^{\frac{1}{2}(Aq,q)+(p,q)} d^n q = e^{\frac{\pi i n}{4} - \frac{\pi i \nu}{2}} \frac{\sqrt{(2\pi)^n}}{\sqrt{|det(A)|}} e^{-\frac{1}{2}(A^{-1}p,p)}, \tag{8.20}$$

όπου το ολοκλήρωμα είναι με την έννοια των κατανομών όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο και το ν συμβολίζει τον αριθμό των αρνητικών ιδιοτιμών του A.

Το πόρισμα αυτό προκύπτει από αναλυτική συνέχεια στο προηγούμενο λήμμα.

Θα δούμε τώρα πως εφαρμόζεται το πόρισμα αυτό για να υπολογίσουμε το Path Integral που αντιστοιχεί στον αρμονικό ταλαντωτή.

Ο τελεστής Hamilton όπως έχουμε ήδη αναφέρει έχει την εξής μορφή :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2 Q^2}{2},$$

όπου τώρα με P, Q συμβολίζουμε τους τελεστές ορμής και θέσης αντίστοιχα.

Πρόταση 8.0.1. *Το Path Integral για τον αρμονικό ταλαντωτή έχει την εξής μορφή :*

$$\int_{P(\mathbb{R})_{q,t}^{q',t'}} e^{\frac{im}{2\hbar}S} \mathcal{D}q = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega T)}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot e^{\left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega T)}\left[(q'^2+q^2)\cos(\omega T) - 2q'q\right]\right)} \tag{8.21}$$

,όπου για $\frac{\pi\nu}{\omega} = T_\nu < T < T_{\nu+1} = \frac{\pi(\nu+1)}{\omega}$, $\nu \in \mathbb{N}$ *έχουμε :*

$$\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega T)}\right)^{\frac{1}{2}} = e^{-\frac{\pi i}{4}-\frac{\pi i\nu}{2}} \cdot \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar|\sin(\omega T)|}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Όταν $T \to T_\nu$*, το δεξιό μέλος συγκλίνει με την έννοια των κατανομών στο* $e^{-\frac{\pi i\nu}{2}}\delta(q-q')$ *για άρτιο* ν *και στο* $e^{-\frac{\pi i\nu}{2}}\delta(q+q')$ *για περιττό* ν*.*

Απόδειξη : Στην περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή, το Path Integral που του αντιστοιχεί είναι ολοκλήρωμα Gauss και μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας το προηγούμενο πόρισμα. Έχουμε :

$$\sum_{k=0}^{n-1}((q_{k+1-q_k})^2 - \epsilon^2 q_k^2) = (A_{n-1}q,q) - 2(p,q) + q^2 + q'^2,$$

όπου $\epsilon = \omega\Delta t$, $q = (q_1, \dots q_{n-1})$, $p = (q, 0, \dots 0, q')$ διανύσματα στον $\mathbb{R}^{n-1}$ και ο A_{n-1} είναι ο ακόλουθος τρι-διαγώνιος πίνακας :

$$A_{n-1} = \begin{bmatrix} 2-\epsilon^2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2-\epsilon^2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2-\epsilon^2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2-\epsilon^2 \end{bmatrix}$$

Από το προηγούμενο πόρισμα προκύπτει η ακόλουθη σχέση :

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} e^{\frac{im}{2\hbar\Delta t}\sum_{k=0}^{n-1}((q_{k+1}-q_k)^2-\epsilon^2 q_k^2)} \prod_{k=1}^{n-1} dq_k$$
$$= e^{-\frac{\pi i\nu}{2}}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t|detA_{n-1}|}}\, e^{\frac{im}{2\hbar\Delta t}\{q^2+q'^2-(A_{n-1}^{-1}p,p)\}}$$

όπου $\nu = \nu_{n-1}$ είναι ο αριθμός των αρνητικών ιδιοτιμών του πίνακα A_{n-1}. Απομένει να βρεθούν τα $detA_{n-1}$ και $(A_{n-1}p,p)$.
Θέτουμε $a_n = detA_n$ και γράφοντας αναλυτικά την σχέση για την ορίζουσα ως προς την τελευταία γραμμή, παίρνουμε την εξής επαναληπτική σχέση :

$$a_{n+1} = (2-\epsilon^2)a_n - a_{n-1}, \;\; n = 0,1,2,\dots$$

με αρχικές συνθήκες $a_{-1} = 0$, $a_0 = 1$. Η σχέση αυτή έχει δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις z^n, z^{-n}, όπου $2-\epsilon^2 = z + z^{-1}$. Η λύση που ικανοποιεί τις αρχικές συνθήκες είναι η εξής :

$$a_n = \frac{z^{n+1} - z^{-n-1}}{z - z^{-1}}$$

Επομένως είμαστε σε θέση να βρούμε τις ιδιοτιμές του πίνακα A_n :

$$\lambda_k = z + z^{-1} - 2cos\frac{\pi k}{n+1}, \;\; k = 1, \ldots n$$

Επειδή $\epsilon = \frac{\omega T}{n}$, έχουμε ότι $z = e^{i\theta}$, όπου $\theta = \epsilon + \mathcal{O}(n^{-2})$ και

$$detA_{n-1} = \frac{\sin n\theta}{\sin\theta} = \frac{\sin\omega T}{\omega\Delta t}(1 + \mathcal{O}(n^{-1})), \;\; \text{καθώς } n \to \infty$$

και για αρκετά μεγάλο n, ο πίνακας A_{n-1} έχει ακριβώς ν αρνητικές ιδιοτιμές εάν $T_\nu < T < T_{\nu+1}$. Για να υπολογίσουμε το εσωτερικό γινόμενο $(A_{n-1}p, p)$, αρκεί να γνωρίζουμε τα γωνιακά σημεία του αντίστροφου πίνακα $B = A_{n-1}^{-1}$, τα οποία δίνονται από τις εξής σχέσεις :

$$B_{11} = B_{n-1n-1} = \frac{a_{n-2}}{a_{n-1}} = \frac{\sin(n-1)\theta}{\sin n\theta}, \;\; B_{1n-1} = B_{n-11} = \frac{1}{a_n} = \frac{\sin n\theta}{\sin\theta}$$

Οπότε παίρνουμε

$$q^2 + q'^2 - (A_{n-1}^{-1}p, p) = \frac{1}{\sin n\theta}\left(2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{(2n-1)\theta}{2}(q^2 + q'^2) - 2\sin\theta qq'\right)$$

Χρησιμοποιώντας τους τύπους αυτούς και περνώντας στο όριο για $n \to \infty$, αποκτούμε την έκφραση για το Path Integral για την περίπτωση όπου $T \neq T_\nu$. Το όριο $T \to T_\nu$ υπολογίζεται χρησιμοποιώντας ένα γνωστό αποτέλεσμα από τη θεωρία των κατανομών :

$$\lim_{t\to 0}\frac{1}{\sqrt{2\pi t}}e^{\frac{i(x-y)^2}{2t}} = e^{\frac{\pi i}{4}}\delta(x-y) \tag{8.22}$$

(Η δέλτα συνάρτηση μπορεί να θεωρηθεί ως το όριο κανονικών κατανομών των οποίων η διασπορά τείνει στο 0)

Βιβλιογραφία

[1] Bernt Øksendal, Stochastic Differential Equations, (2000)

[2] Richard Bass, Diffusions and Elliptic Operators, (1998)

[3] Brian Hall, Quantum Theory for Mathematicians, (2013)

[4] Leon Takhtajan, Quantum Mechanics for Mathematicians, (2008)

[5] Gerald Folland, Quantum Field Theory, A tourist guide for Mathematicians, (2008)

[6] Richard Feynman, Quantum Electrodynamics, (1961)

[7] Richard Feynman, Quantum Mechanics and Path Integrals, (1965)

[8] Δημήτρης Χελιώτης, Εισαγωγή στον στοχαστικό λογισμό, (2015)

[9] Daisuke Fujiwara, Remarks on convergence of the Feynman Path Integrals, Duke Mathematical Journal, (1980)

[10] Βασίλειος Παπανικολάου, On the convergence of the Feynman Path Integral for a certain class of potentials, Journal of Mathematical Physics, (1990)