数学模型 Lecture Notes

Zhennan Zhou

2022 年 5 月 3 日

PRELIMINARY DRAFT. NOT FOR WIDE CIRCULATION.

参考：教材一第9，12章。

6 概率、随机模型

It is scientific only to say what's more likely or less likely, and not to be proving all the time what's possible or impossible.

—— Richard Feynman

6.1 果壳中的概率（Probability in a nutshell）（不直接考察）

概率空间(Ω, F, P)是一个总测度为1的测度空间（即$P(\Omega) = 1$）。

- Ω是一个非空集合，称为样本空间（Sample Space），他的元素称为样本输出（Outcome）。
- F是样本空间Ω的幂集的一个非空子集 (Ω的子集的集合)，它的元素称为事件（Event），事件是样本空间的子集。
- P称为概率(测度)。$P: F \to \mathbb{R}$。每个事件都被P赋予一个0和1之间的概率值。

随机变量$X: \Omega \to E$是从样本空间到可测空间E的可测函数。这门课里面，我们只考虑$E = \mathbb{R}$。随机变量取值$S \subset E$的概率我们记为

$$\Pr\big(X \in S\big) = P\big(\{\omega \in \Omega | X(\omega) \in S\}\big).$$

离散的随机变量可以被离散的概率密度刻画:

$$\mathbf{f} = \{f_i\}; \quad f_i \geq 0, \quad , i \in \mathbb{N}; \quad \sum_{i \in \mathbb{N}} f_i = 1.$$

如果X服从离散概率密度$\mathbf{f}$，我们记为$X \sim \mathbf{f}$。这个离散变量的累积分布函数$\mathbf{F} = \{F_i\}$定义为$F_n = \sum_{i \leq n} f_i$。我们易知，$0 \leq F_i \leq 1$, 而且 $F_n = \Pr(X \leq n)$。

如果（一维）随机变量 X 是连续的，那么我们有概率密度函数 $f(x)$，满足

$$f(x) \geq 0, \quad \int_{\mathbb{R}} f(x)dx = 1.$$

而相应的累计分布函数为 $F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(s)ds$。

关于记号做一点说明：虽然事件是样本空间的子集，但是，我们也习惯的用随机变量相对应的表示，比如事件$\{\omega \in \Omega | u < X(w) \leq v\}$，这个事件也简写为$u < X \leq v$。

条件概率$P(A|B)$是指事件A在另外一个事件B已经发生条件下的发生概率，定义为

$$P(A|B)=\frac{P(A\cap B)}{P(B)}.$$

两个事件A和B是（统计）独立的，当且仅当 $P(A\cap B)=P(A)P(B)$。易知，如果A和B是独立事件，$P(A|B)=P(A), P(B|A)=P(B)$。

一般的，根据 $P(A\cap B)=P(A)P(B|A)=P(B)P(A|B)$，我们得到贝叶斯公式

$$P(A|B)=\frac{P(A)P(B|A)}{P(B)}.$$

（离散）随机变量的期望（或称均值），是随机变量在概率分布下的平均值。我们用 $\mathbb{E}$ 表示期望，

$$\mathbb{E}X=\sum_i X_i f_i.$$

有时候，我们也用 $\bar{X}$ 表示期望。我们也可以对随机变量的函数求期望。比如，方差定义为

$$\mathrm{Var}(X)=D(X)=\mathbb{E}(X-\mathbb{E}X)^2=\mathbb{E}(X^2)-(\mathbb{E}X)^2.$$

最后，随机过程是指如下的一族的随机变量

$$\{X(t):t\in T\},\quad \text{或写成}\quad \{X_t:t\in T\}.$$

这里，T 是一个指标集，可以是连续的，也可以离散的。如果 $t\in\mathbb{R}$，它常被理解为时间，而 $X(t)$ 是某个可观测量在时间 t 时对应的随机变量。有时候，人们也会把一个随机过程写成 $\{X(t,\omega):t\in T\}$，表明它其实是 $t\in T$ 和 $\omega\in\Omega$ 的二元函数。

需要注意的是，在使用随机过程来建立数学模型的时候，我们总有两个角度：

- 随机变量 $X(t)$ 的随 t 变化的变化规律；
- 概率密度 $\{f_i(t)\}$ 或者 $f(x,t)$ 随时间的演化规律。

6.2 初等概率模型举例：随机人口模型

我们首先看一个随机变量取值离散，而时间连续变化的例子。时刻 t 的人口数量用随机变量 $X(t)$ 表示，$X(t)$ 只取非负整数值。记 $P_n(t)$ 是 $X(t)=n$ 的概率，$n=0,1,2,\cdots$。

下面我们对出生和死亡的概率做出适当的假设，寻求 $P_n(t)$ 的变化规律，并由此得到 $X(t)$的期望和方差。

若 $X(t)=n$，对于充分小的时间Δt，我们对人口在 t 到 $t+\Delta t$ 的出生和死亡做如下的假设：

- 出生一人的概率与 Δt 成正比，记为 $b_n\Delta t$，出生两人及以上的概率是$o(\Delta t)$。且 b_n 与 n 成正比，记为 $b_n=\lambda n$。
- 死亡一人的概率与 Δt 成正比，记为 $d_n\Delta t$，出生两人及以上的概率是$o(\Delta t)$。且 d_n 与 n 成正比，记为 $d_n=\mu n$。
- 出生死亡是相互独立的随机事件。

思考：如果给出 $\Pr(X(t+\Delta t)=\ell|X(t)=n)$？

对于概率密度，我们得到，

$$P_n(t+\Delta t)=P_{n-1}(t)b_{n-1}\Delta t+P_{n+1}(t)d_{n+1}\Delta t+P_n(t)(1-b_n\Delta t-d_n\Delta t)+o(\Delta t).$$

于是，我们得到如下的微分方程

$$\frac{dP_n}{dt} = \lambda(n-1)P_{n-1} + \mu(n+1)P_{n+1} - (\lambda+\mu)nP_n. \tag{6.1}$$

如果我们假设，在初始时刻（t=0）人口为确定的数量 n_0，则 $P_n(t)$ 的初始条件为

$$P_{n_0}(0) = 1, \quad P_n(0) = 0, \quad n \neq n_0. \tag{6.2}$$

从随机过程的角度，我们得到了一个马氏链模型（见6.4节），但是从概率密度函数的角度看，我们其实得到了一个无穷维的变化率模型，这里的状态变量是 $\{P_n(t)\}_{n=0}^{\infty}$。

求解这些方程非常复杂，但是如果我们只关心 $X(t)$ 的期望（以下简记 $E(t)$ ）和方差(以下简记 $D(t)$)，则我们可以由(6.3)和(6.4)直接得到。根据期望的定义，$E(t) = \sum_n nP_n(t)$。我们可以得到 $E(t)$ 满足的方程

$$\frac{dE}{dt} = \lambda\sum_{n=1}^{\infty} n(n-1)P_{n-1} + \mu\sum_{n=1}^{\infty} n(n+1)P_{n+1} - (\lambda+\mu)\sum_{n=1}^{\infty} n^2P_n.$$

经过化简（化简中，我们不妨假设 $P_0 = P_1 = 0$ ），我们得到

$$\frac{dE}{dt} = (\lambda-\mu)E.$$

而它的初始条件为$E(0) = n_0$。所以，我们得到方程的解

$$E(t) = n_0 e^{(\lambda-\mu)t}.$$

注意，这个形式就和非随机的模型完全一致了。

对于方差 $D(t)$, 按照定义$D(t) = \sum_{n=1}^{\infty} n^2P_n(t) - E^2(t)$. 可以推出（练习）

$$D(t) = n_0\frac{\lambda+\mu}{\lambda-\mu}e^{(\lambda-\mu)t}[e^{(\lambda-\mu)t} - 1].$$

最后，我们做一个观察，如果我们假设没有出生，只有死亡，那么从期望上看，我们得到期望人口所满足的方程是

$$E(t) = n_0e^{-\mu t}, \quad \text{即} \quad \frac{dE}{dt} = -\mu E, \quad E(0) = n_0.$$

这样，我们对第二章的 Decay 过程多了一种微观的理解：它可以看作是一个随机过程的平均行为。

6.3 初等概率模型举例：化学主方程

上一节中我们观察到，一些连续时间的随机模型在期望的意义下，可以得到变化率模型。那么如果把变化率模型看作一种宏观模型，我们可以找到其对应的微观的随机模型吗？

主方程（Master Equation）是统计力学中的核心概念之一，在物理、化学中有广泛的应用，也有很多数学家对它进行了深入的研究。20世纪40年代开始，化学主方程（Chemical Master Equation）也开始被应用到生物系统的研究中。而在70年代初，概率学家 Kurtz 严格证明了，化学主方程模型的热力学极限就是质量作用定律。

我们回忆可知，质量作用定律的状态变量是各物质的浓度，其时间演化是没有随机性的。而化学主方程的状态变量是各物质的粒子数，而粒子数的演化是随机的。

我们以异构化的可逆反应为例

$$A \underset{k_1}{\overset{k_2}{\leftrightarrows}} B \quad \Rightarrow \quad \{ \quad A \xrightarrow{k_1} B \quad \text{and} \quad B \xrightarrow{k_2} A \quad \}$$

由质量作用定律，我们得到如下变化率模型（回忆知，这里 $A(t)$ 和 $B(t)$ 表示物质的浓度）

$$\frac{dA}{dt} = -k_1A + k_2B, \quad \frac{dB}{dt} = +k_1A - k_2B.$$

注意，由质量守恒，即 $\frac{d}{dt}(A+B)=0$，我们可以令 $A+B=E_0$，E_0 是常数，表示两种物质的总浓度，那么我们可以将可逆反应简化成一个方程

$$\frac{dA}{dt}=-k_1A+k_2(E_0-A).$$

如果我们令反应容器的体积为 V，那么两种粒子的总粒子数 $N=E_0V$ 也是一个定值。当 N 比较小的时候，化学反应将表现出较大的随机性。考虑 t 时刻系统中 A 分子的数量，记为 $n_A(t)$。显然，$n_A(t)\in\{0,1,2,\cdots,N\}$，而 $n_A(t)$ 可视为一个随机过程，其概率分布记为

$$P_n(t)=\Pr(n_A(t)=n),\quad n\in\{0,1,2,\cdots,N\},\quad t>0.$$

若 $n_A(t)=n$，对于充分小的时间Δt，我们对在 t 到 $t+\Delta t$ 的化学反应做如下的假设：

- 发生一次 $A\xrightarrow{k_1}B$ 反应的概率与 Δt 成正比，记为 $b_n\Delta t$，出生两次及以上的概率是$o(\Delta t)$。且 b_n 与 n 成正比，记为 $b_n=k_1n$ （因为此时有 n 个 A 分子）。
- 发生一次 $B\xrightarrow{k_2}A$ 反应的概率与 Δt 成正比，记为 $d_n\Delta t$，发生两次及以上的概率是$o(\Delta t)$。且 d_n 与 $N-n$ 成正比，记为 $d_n=k_2(N-n)$ （因为此时有 $N-n$ 个 B 分子）。
- 发生这两个反应是相互独立的随机事件。

类似于上一节的方法，我们可以推出如下的微分方程

$$\frac{dP_n}{dt}=k_2(N-n+1)P_{n-1}+k_1(n+1)P_{n+1}-\big(k_1n+k_2(N-n)\big)P_n. \tag{6.3}$$

如果我们假设，在初始时刻（t=0）系统中 A 分子的数量是确定的，为 n_0，则 $P_n(t)$ 的初始条件为

$$P_{n_0}(0)=1,\quad P_n(0)=0,\quad n\neq n_0. \tag{6.4}$$

从随机过程的角度，我们得到了一个马氏链模型（见6.4节），但是从概率密度函数的角度看，我们其实得到了一个有限维的变化率模型，这里的状态变量是 $\{P_n(t)\}_{n=0}^N$。

接下来，我们考虑粒子数的均值和方差随时间的演化。令

$$E(t)=\sum_{n=0}^{N}nP_n(t),\quad V(t)=\sum_{n=0}^{N}n^2P_n(t)-(E(t))^2.$$

那么经过直接计算，可以推导出均值 E 满足的方程

$$\frac{dE}{dt}=-k_1E-k_2E+k_2N.$$

由于 V 是反应容器的体积，则容器中 A 分子的浓度为 $A(t)=E(t)/V$。由于总粒子数 $N=E_0V$，于是我们得到了上述粒子均值 E 的方程等价于

$$\frac{dA}{dt}=-k_1A-k_2A+k_2E_0.$$

即，质量作用定律方程。

类似地，我们也可以推导出粒子数方差 V 满足的方程

$$\frac{dV}{dt}=-2(k_1+k_2)V+k_2N+(k_1-k_2)E.$$

我们可以直接求解 E 和 V 满足的方程，得到他们的长时间渐进行为：当 $t\to\infty$，

$$E\to\bar{E}=\frac{k_2N}{k_1+k_2},\quad V\to\bar{V}=\frac{k_1k_2N}{(k_1+k_2)^2}.$$

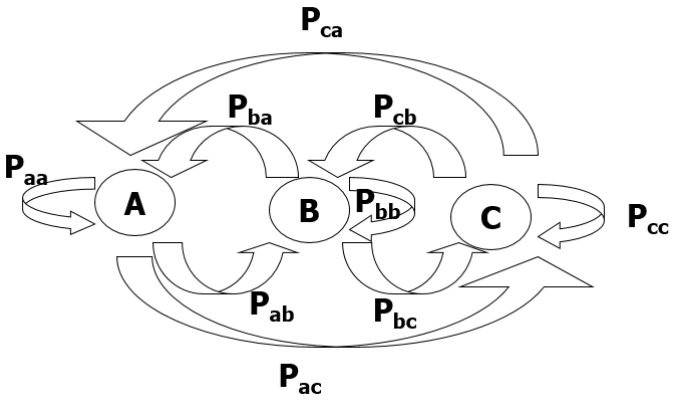
最后需要补充说明的是，对于上述单分子反应，质量作用定律中的反应系数和化学主方程中的反应系数可以认为是相同的。但是对于多分子反应，可能会在两类模型中出现不同的反应系数，我们在本讲义中就不再过多介绍了。

6.4 马氏链模型和数学理论

在考虑随机动力系统时，系统在每个时刻所处的状态是随机的，从这个时期到下一个时期的状态按照一定的概率进行转移，并且下个时期的状态只与这个时期的状态和转移概率有关，与以前各个时期的状态无关，这种性质称为无后效性，或马尔科夫（Markov）性。这种随机转移过程通常用马氏链模型来描述。注意，在本小节中，我们考虑的时间都是离散的。

6.4.1 引例

某大学有三个食堂A、B、C。调查显示：在食堂A就餐的人中 p_{aa} 部分仍然回到食堂A，有 p_{ab} 部分选择食堂B，p_{ac} 部分选择食堂C；在食堂B就餐的人中 p_{bb} 部分仍然回到食堂B，有 p_{ba} 部分选择食堂A，p_{bc} 部分选择食堂C；在食堂C就餐的人中 p_{cc}部分仍然回到食堂C，有 p_{ca} 部分选择食堂A，p_{cb}部分选择食堂B；如图所示。



- 令A_n为第n天在食堂A就餐的人数比例;
- 令B_n为第n天在食堂B就餐的人数比例;
- 令C_n为第n天在食堂C就餐的人数比例。

于是我们有

$$\pi_{n+1}^T := \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \\ C_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{aa}A_n + p_{ba}B_n + p_{ca}C_n \\ p_{ab}A_n + p_{bb}B_n + p_{cb}C_n \\ p_{ac}A_n + p_{bc}B_n + p_{cc}C_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{aa} & p_{ba} & p_{ca} \\ p_{ab} & p_{bb} & p_{cb} \\ p_{ac} & p_{bc} & p_{cc} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \\ C_n \end{pmatrix} =: P^T\pi_n^T = (\pi_n P)^T.$$

6.4.2 马氏链选讲

我们回忆到，对于离散的时间 $t = 0, 1, \cdots$ 的每一个 t 对应一个随机变量 $\xi_t(\omega)$，我们把 $\{\xi_0, \xi_1, \cdots, \xi_n, \cdots\}$ 这样一个随机变量的序列叫做离散时间的随机过程。

所有 $\xi_n(\omega)$ 具有公共的取值集合, 我们把此集合叫做状态空间，记为 S，其元素称为状态。

离散时间离散状态的随机过程$\{\xi_n,\ n \geq 0\}$，状态空间 S 为有限或者可数集合，如果满足

$$\Pr(\xi_{n+1} = j | \xi_n = i, \xi_{n-1} = i_{n-1}, \cdots, \xi_0 = i_0) = \Pr(\xi_{n+1} = j | \xi_n = i),$$

称其为一个离散时间马氏链，其中的条件概率 $\Pr(\xi_{n+1} = j|\xi_n = i)$ 称为其在时刻n处的转移概率 $p_{ij}(n)$，而 $P(n) = (p_{ij}(n))$ 称为时刻n处的转移概率矩阵。

如果马氏链的转移矩阵与出发时刻无关，即$P(n)$与n无关，则称此马氏链是时齐的。这时可将转移概率矩阵简记为 $P=(p_{ij})$。通常不特别说明, 马氏链就指时齐马氏链。

对于状态空间有限的情况（不妨假设只有 k 个状态），令 $a_j(n)=\Pr(\xi_n=j)$，则马氏链的基本方程为

$$a_i(n+1)=\sum_{j=1}^{k}a_j(n)p_{ji},\quad i=1,\cdots,k.$$

这里，我们要求

$$\sum_{j=1}^{k}a_j(n)=1,\quad n=0,1,\cdots$$

$$p_{ij}\geq 0,\quad i,j=1,\cdots,k.\quad \sum_{j=1}^{k}p_{ij}=1,\quad i=1,\cdots,k.$$

状态概率向量和多步转移概率　如果我们记状态概率向量

$$\mathbf{a}(n)=(a_1(n),\cdots,a_k(n)),\quad n=0,1,\cdots$$

（注意，我们一般认为状态概率向量是横向量）则我们有

$$\mathbf{a}(n+1)=\mathbf{a}(n)P,\quad \mathbf{a}(n)=\mathbf{a}(0)P^n.$$

另外，我们也可以证明

$$\Pr(\xi_{n+m}=j|\xi_m=i)=(P^n)_{ij}.$$

我们考虑一个例子：赌徒游戏。假设你是一个赌徒，每场赌博赢一块钱的概率是 0.4 而输一块钱的概率是 0.6。如果你的财富达到 3 元或者变成 0 元，你都会停止赌博。若令 X_n 表示 n 局之后你的财富值，那么 $X_n\in\{0,1,2,3\}$。我们注意到 $\{X_n\}$ 是一个马氏链。它的单步转移概率矩阵和 100 步转移概率矩阵如下。

P	0	1	2	3
0	1	0	0	0
1	0.6	0	0.4	0
2	0	0.6	0	0.4
3	0	0	0	1

P^{100}	0	1	2	3
0	1	0	0	0
1	0.7895	0	0	0.2105
2	0.4737	0	0	0.5263
3	0	0	0	1

注意到，在多步之后，你的财富值为 1 或者 2 的可能性就几乎没有了。可见，一个马氏链中状态有不同的类别和特性。特别地，有些状态满足 $p_{ii}=1$，我们把这样的状态叫做**吸收态**。在这个赌徒问题中，0 和 3 是吸收态。

当一个马氏链带有吸收态的时候，我们自然会关心一些有趣的问题。比如，链会被吸收于哪个状态？链被吸收需要花多久的时间？

例子 1. 两年制学校。在某所神秘的学校中只有两个年级。一年级学生中，60%会升到二年级，25%会复读一年级，15%会退学；二年级学生中，70%会毕业，20%会复读二年级，10%会退学。那么新生最终毕业的比例是多少？

如果我们用 1 表示一年级生，2 表示二年级生，3 表示毕业，4 表示退学，那么我们可以用一个马氏链来描述此问题。其概率转移矩阵为

P	1	2	3	4
1	0.25	0.6	0	0.15
2	0	0.2	0.7	0.1
3	0	0	1	0
4	0	0	0	1

我们用 $h(x)$ 表示现在状态为 x 的学生最终毕业的概率，则我们立刻有 $h(3)=1, h(4)=0$。那么考虑一步转移，我们有

$$h(i)=\sum_j p_{ij}h(j).$$

于是我们有，

$$h(1)=0.25h(1)+0.6h(2),\quad h(2)=0.2h(2)+0.7h(3),\quad h(3)=1.$$

解得

$$h(1)=\frac{7}{10},\quad h(2)=\frac{7}{8}.$$

不变分布 状态空间 S 上的一个概率分布称为转移概率矩阵P的不变概率分布(简称不变分布)，如果

$$\pi P=\pi,\quad \sum_{j=1}^{k}\pi_j=1,\quad \pi_j\geq 0,\quad j=1,\cdots,k.$$

注意，这时候，π^T可以看作是 P^T 特征值为 1 的特征向量，即

$$P^T\pi^T=1\,\pi^T.$$

我们自然也可以追问下去，那么是不是一个一般的状态概率向量会在充分多步之后收敛到不变分布呢？对这个问题的讨论一般性讨论超出了本课的范围，但是我们可以通过一些具体的例子得到一定的观察。

下面通过几个例子来理解马氏链模型的数学结构。在接下来的例子中，我们考虑一个非常简单的情况，状态的个数为 2。我们考察当 $n\to\infty$ 时，状态概率向量 $\mathbf{a}(n)$ 的渐进行为。

例子 2. 考虑如下转移矩阵

$$P=\begin{pmatrix}1-a & a\\ b & 1-b\end{pmatrix},\quad 0\leq a,b\leq 1.$$

特征值为1和$1-(a+b)$, 相应的特征向量为

$$\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}a\\-b\end{pmatrix}.$$

于是有相似变换

$$\begin{aligned}P&=\begin{pmatrix}1-a & a\\ b & 1-b\end{pmatrix}\\ &=\begin{pmatrix}1 & a\\ 1 & -b\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1-a-b\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & a\\ 1 & -b\end{pmatrix}^{-1}.\end{aligned}$$

通过计算，我们容易得到

$$\begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & -b \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{a+b}\begin{pmatrix} b & a \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

于是，

$$\begin{aligned} P^n &= \begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & -b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & (1-a-b)^n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & -b \end{pmatrix}^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & -b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & (1-a-b)^n \end{pmatrix}\frac{1}{a+b}\begin{pmatrix} b & a \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

下面我们分三种情况讨论，

- Case A. $0 < a+b < 2, a \neq 1, b \neq 1$, 则所有元素非0,

$$\begin{aligned} P^n &\to \begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & -b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{a+b}\begin{pmatrix} b & a \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{a+b}\begin{pmatrix} b & a \\ b & a \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

  容易验证，此时，不变分布为 $\pi = [\frac{b}{a+b}, \frac{a}{a+b}]$.

- Case B. $a = b = 0$, P 为单位矩阵，$P^n = P$.

- Case C. $a = b = 1$, 则

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad P^{2k} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I, \quad P^{2k+1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = P.$$

  此时 P^n 极限不存在。但平均极限存在

$$\lim_{n\to+\infty}\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}P^k = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

当状态空间的元素比较多的时候，考查状态概率向量的渐进行为比较困难了，很多的分析方法大家会在《随机过程》等相关课程中学习。不过，对于一些复杂的情况，我们可以直接求解马氏链模型的不变分布。下面，我们考虑一个有实际背景的例子。

例子 3. Ehrenfest模型。 容器内有 $2a$ 个粒子，一张薄膜将容器分成对称的 A,B 两部分。将粒子穿过薄膜时占用的时间忽略不计。用 X_0 表示初始时 A 中的粒子数，X_n 表示有 n 个粒子穿过薄膜后 A 中的粒子数。假设 $\{X_n\}$ 是马氏链，有状态空间 $I = \{0, 1, \cdots, 2a\}$。设转移概率

$$p_{ij} = \begin{cases} \dfrac{2a-i}{2a}, & ,0 \le i \le 2a-1,\ j = i+1, \\ \dfrac{i}{2a}, & 1 \le i \le 2a,\ j = i-1, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

已知该马氏链的不变分布唯一存在，计算不变分布 π。

补充定义 $\pi_{-1} = \pi_{2a+1} = 0$, 则方程组 $\pi P = \pi$ 可以写成

$$\pi_i = \pi_{i-1}p_{i-1,i} + \pi_{i+1}p_{i+1,i}, \quad 0 \le i \le 2a.$$

注意到，这其实是一族的代数方程（参考第6章差分方程的一般形式），我们可以把它写成

$$\pi_{i+1} = \frac{\pi_i - \pi_{i-1} p_{i-1,i}}{p_{i+1,i}}.$$

于是，我们可以顺次计算

$$\begin{aligned}
\pi_1 &= \frac{\pi_0}{p_{10}} = 2a\pi_0 = C_{2a}^1 \pi_0. \\
\pi_2 &= \frac{\pi_1 - \pi_0 p_{01}}{p_{21}} = \frac{(\pi_1 - \pi_0)2a}{2} = (2a-1)a\pi_0 = C_{2a}^2 \pi_0. \\
\pi_3 &= \cdots = C_{2a}^3 \pi_0. \\
&\cdots \\
\pi_{2a} &= C_{2a}^{2a} \pi_0.
\end{aligned}$$

利用

$$\pi_0 + \pi_1 + \cdots + \pi_{2a} = 2^{2a}\pi_0 = 1,$$

得到 $\pi_0 = 2^{-2a}$。于是我们得到不变分布

$$\pi_i = C_{2a}^i \left(\frac{1}{2}\right)^{2a} = C_{2a}^i \left(\frac{1}{2}\right)^i \left(\frac{1}{2}\right)^{2a-i}, \quad i = 0, \cdots, 2a.$$

这是一个二项分布，说明在不变分布下，或者时间充分长以后，各个粒子的位置是相互独立的，每个粒子在 A 的概率是1/2。

最后我们再看一个比较复杂的马氏链模型。特别是，我们在模型中引入了迁入和迁出的机制。

例子 4. 等级结构。 设一个社会从低到高分成了 k 个等级。时间以年为单位离散化，即每年只进行一次调动。等级记作 $i = 1, \cdots, k$。时间记作 $t = 0, 1, \cdots$ 我们引入如下的记号：

- $\mathbf{n}(t) = (n_1(t), \cdots, n_k(t))$，$n_i(t)$ 为第 t 年属于等级 i 的人数；$N(t) = \sum_{i=1}^k n_i(t)$ 为第 t 年的总人数。
- $\mathbf{a}(t) = (a_1(t), \cdots, a_k(t))$ 称等级结构，$a_i(t) = \frac{n_i(t)}{N(t)}$ 为第 t 年属于等级 i 的人数比例，$\sum_{i=1}^k a_i(t) = 1$。
- $Q = \{p_{ij}\}_{k\times k}$， p_{ij} 为每年从等级 i 转移至等级 j （的人口在等级 i 人口中占）的比例。
- $\mathbf{w} = (w_1, \cdots, w_k)$ 为每年从等级 i 退出（在等级 i 中占）的比例。第 t 年退出的总人数为

$$W(t) = \sum_{i=1}^k w_i n_i(t) = \mathbf{n}(t)\mathbf{w}^T.$$

而且，我们可以看出

$$\sum_{i=1}^k p_{ji} + w_j = 1, \quad j = 1, \cdots, k.$$

- $\mathbf{r} = (r_1, \cdots, r_k)$ 为每年调入等级 i 的在总调入人数的比例。第 t 年调入的总人数为 $R(t)$，则第 t 年调入等级 i 的人数为 $r_i R(t)$。显然，$\sum_{i=1}^k r_i = 1$。

为了导出 $\mathbf{n}(t)$ 的变化规律，我们先注意到

$$N(t+1) = N(t) + R(t) - W(t).$$

而且

$$n_j(t+1) = \sum_{i=1}^k p_{ij} n_i(t) + r_j R(t), \quad j = 1, \cdots, k.$$

用矩阵来表示，则有

$$\mathbf{n}(t+1) = \mathbf{n}(t)Q + R(t)\mathbf{r}.$$

但是需要注意的是，Q 并非概率转移矩阵（想想为什么）。我们用 $M(t)$ 表示 t 到 t+1 年的净增长量，则

$$R(t) = W(t) + M(t) = \mathbf{n}(t)\mathbf{w}^T + M(t)$$

我们代入可得，

$$\mathbf{n}(t+1) = \mathbf{n}(t)(Q + \mathbf{w}^T\mathbf{r}) + M(t)\mathbf{r} =: \mathbf{n}(t)P + M(t)\mathbf{r}.$$

注意，P 的行和是 1，所以 P 是一个概率转移矩阵。

下面我们考虑一个特殊的形式，$M(t) = \alpha N(t)$，即每年的总人数按照百分比 α 增长，可以推出等级结构满足的方程为

$$\mathbf{a}(t+1) = (1+\alpha)^{-1}(\mathbf{a}(t)P + \alpha\mathbf{r}).$$

特别的，如果我们进一步假设每年总人数不变，那么 $\alpha = 0$，于是我们有

$$\mathbf{a}(t+1) = \mathbf{a}(t)P = \mathbf{a}(t)(Q + \mathbf{w}^T\mathbf{r}). \tag{6.5}$$

接下来，我们将调入比例 $\mathbf{r}$ 看作是一个可以控制的自由度，从优化和控制的角度进一步研究这个模型。首先，我们注意到，不同的调入比例 $\mathbf{r}$ 会对应上述马氏链模型不同的不变分布 $\mathbf{a}$。于是我们引入如下的定义。

根据这个方程，对于某个等级结构 $\mathbf{a}$，如果存在调入比例 $\mathbf{r}$，使得

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}P = \mathbf{a}(Q + \mathbf{w}^T\mathbf{r}). \tag{6.6}$$

则称 $\mathbf{a}$ 为稳定结构。注意，这里的 $\mathbf{r}$ 需要满足

$$\sum_{i=1}^{k} r_i = 1, \quad r_i \geq 0, \quad i = 1, \cdots, k.$$

由(6.6)，我们得到

$$\mathbf{r} = \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}Q}{\mathbf{a}\mathbf{w}^T}.$$

得以验证 $\sum_{i=1}^{k} r_i = 1$ 是满足的，但是为了 $r_i \geq 0, \quad i = 1, \cdots, k$，我们可以稳定结构 $\mathbf{a}$ 的范围由

$$\mathbf{a} \geq \mathbf{a}Q$$

决定，这称为等级结构的稳定域。

*最后这块讨论技巧性太大，属于选读的内容。我们讨论通过控制调入比例 r 对等级结构进行动态调节。设理想的等级结构是 $\mathbf{a}^*$，并假设 $\mathbf{a}^*$ 在稳定域里面。已知 $\mathbf{a}(0)$，求调入比例 $\mathbf{r}$ 使得 $\mathbf{a}(1)$ 尽可能的接近 $\mathbf{a}^*$。再求一个新的调入比例 $\mathbf{r}$ 使得 $\mathbf{a}(2)$ 尽可能的接近 $\mathbf{a}^*$，以此类推。

对于等级结构，我们首先引入任意两个等级结构 $\mathbf{a}^{(1)} = (a_1^{(1)}, \cdots, a_k^{(1)})$ 和 $\mathbf{a}^{(2)} = (a_1^{(2)}, \cdots, a_k^{(2)})$ 之间的距离

$$D(\mathbf{a}^{(1)}, \mathbf{a}^{(2)}) = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i (a_i^{(1)} - a_i^{(2)})^2,$$

其中 $\lambda_i \geq 0$ 为加权因子。

我们可以把问题总结为 (E1)

$$\min_{r_i} \quad D(\mathbf{a}(1), \mathbf{a}^*)$$

$$\text{s.t.} \quad \mathbf{a}(1) = \mathbf{a}(0)(Q + \mathbf{w}^T\mathbf{r}), \quad \sum_{i=1}^{k} r_i = 1, \quad r_i \geq 0, \quad i = 1, \cdots, k.$$

注意到，

$$\mathbf{a}^* - \mathbf{a}(1) = \mathbf{a}(0)\mathbf{w}^T \left[\frac{\mathbf{a}^* - \mathbf{a}(0)Q}{\mathbf{a}(0)\mathbf{w}^T} - \mathbf{r} \right].$$

如果记

$$\mathbf{y} = \frac{\mathbf{a}^* - \mathbf{a}(0)Q}{\mathbf{a}(0)\mathbf{w}^T}, \quad \mathbf{y} = (y_1, \cdots, y_k),$$

则 $\mathbf{a}^* - \mathbf{a}(1)$ 与 $\mathbf{y} - \mathbf{r}$ 成正比，而且容易验证 $\sum_{i=1}^k y_i = 1$.

于是，我们把问题转化为 (E2)

$$\begin{aligned} \min_{r_i} \quad & \sum_{i=1}^k \lambda_i (y_i - r_i)^2 \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^k r_i = 1, \quad r_i \geq 0, \quad i = 1, \cdots, k. \end{aligned}$$

不妨令 $\mathbf{r}^*$ 表示最优值。

我们注意到，如果 $y_i \geq 0, \quad i = 1, \cdots, k$，则（E2）的解显然为

$$r_i = y_i, \quad i = 1, \cdots, k.$$

否则，我们将$\{1, \cdots, k\}$ 按按照 y_i 的符号分成两部分 I_1 和 I_2，即

$$y_j > 0, \quad \forall j \in I_1; \quad y_l \leq 0, \quad \forall l \in I_2.$$

于是，我们有

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i (y_i - r_i)^2 = \sum_{j \in I_1} \lambda_j (y_j - r_j)^2 + \sum_{l \in I_2} \lambda_l (|y_l| + r_l)^2.$$

注意到，$\sum_{j \in I_1} y_j > 1$，易知若使和式最小，应有

$$r_j \leq y_j, \quad \forall j \in I_1; \quad r_l = r_l^* = 0, \quad \forall l \in I_2.$$

最后，我们得到问题（E3）

$$\begin{aligned} \min_{r_j, j \in I_1} \quad & \sum_{j \in I_1} \lambda_j (y_j - r_j)^2 \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{j \in I_1} r_j = 1, \quad y_j \geq r_j \geq 0, \quad j \in I_1. \end{aligned}$$

利用拉格朗日因子法，我们可以求解这个条件极值问题。我们引入因子 α，（E3）的目标函数为

$$G = \sum_{j \in I_1} \lambda_j (y_j - r_j)^2 + 2\alpha \sum_{j \in I_1} r_j.$$

利用 $\partial G / \partial r_j = 0$，可知

$$r_j = y_j - \frac{\alpha}{\lambda_j}.$$

再利用 $\sum_{j \in I_1} r_j = 1$ 可以得到，如果令

$$\alpha = \frac{\sum_{j \in I_1} y_j - 1}{\sum_{j \in I_1} \lambda_j^{-1}},$$

于是我们得到

$$r_j = y_j - \frac{\alpha}{\lambda_j}, \quad j \in I_1.$$

注意，我们在求解中并没有要求 $y_j \geq r_j \geq 0$。显然，$y_j \geq r_j$ 对所有的 j 是满足的，但是可能存在 $j' \in I_1$，使得 $r_{j'} < 0$。这时候，我们令 $r^*_{j'} = 0$，然后利用 $\sum_{j \in I_1, j \neq j'} r_j = 1$ 重新定义 α, 然后再次求解剩下的 r_j。重复以上操作，直到得到非空的 $I_1^* \subset I_1$，使得 $\forall j \in I_1^*, r_j = y_j - \frac{\alpha}{\lambda_j} \in [0, y_j]$。此时，

$$\alpha = \alpha^* = \frac{\sum_{j \in I_1^*} y_j - 1}{\sum_{j \in I_1^*} \lambda_j^{-1}},$$

最终，（E3）的解为

$$r_j^* = \begin{cases} y_j - \dfrac{\alpha^*}{\lambda_j}, & j \in I_1^*; \\ 0, \quad \text{otherwise.} \end{cases}$$

6.4.3 一些马氏链的相关概念*

对于马氏链，我们进一步引入几个相关概念，更多的概念大家会在随机过程相关的课程中学习到

- 可达：状态i称为可达状态j, 如果存在一个指标序列 $i_0 = i, i_1, \cdots, i_n = j$，使得

  $$p_{i_k, i_{k+1}} > 0 \quad k = 0, 1, \cdots, n-1.$$

  用转移概率矩阵来刻画 i可达 j:

  $$\exists\, n > 0, \quad (p^n)_{ij} > 0.$$

  这里，$(p^n)_{ij} = \Pr(\xi_n = j | \xi_0 = i)$ 是n步转移概率。

- 吸收：如果 $p_{ii} = 1$, 则称 i 是吸引（吸收）状态。

- 互通：状态i可达状态j，而且状态j可达状态i.

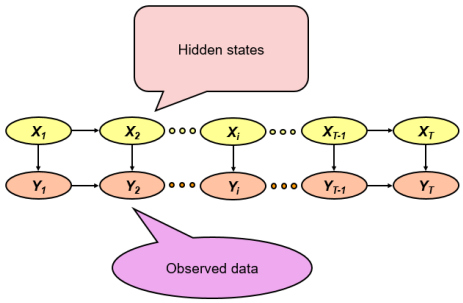
- 不可约：如果所有状态之间是互通的.

- 首达概率：令 $f_{ij}(n)$ 为由 i 出发在 n 步后首次达到 j 的概率，简称首达概率。即

  $$f_{ij}^{(n)} = \Pr\left(\xi_n = j, \xi_m \neq j, m = 1, \cdots, n-1 \,|\, \xi_0 = i\right).$$

- 令 f_{ij}^* 是从 i 出发到达 j 的概率，即

  $$f_{ij}^* = \sum_{n=1}^{\infty} f_{ij}^{(n)} \leq 1.$$



在很多实际问题中，我们并不能直接知道状态变量的取值，但是我们也许可以对状态变量做一些观察。为此，我们需要引入隐马氏链的数学模型：

- 隐过程为 $X=\{X_1,\cdots,X_T\}$， $X_i\in\{1,\cdots,N\}$.
- 观察过程为 $Y=\{Y_1,\cdots,Y_T\}$， $Y_i\in\{1,\cdots,M\}$.
- 模型参数为 $\lambda=\{\pi,A,B\}$，其中
  - 初始分布 $\pi=(\pi_i),\pi_i=\Pr(X_1=i)$.
  - 转移矩阵 $A=(a_{ij}),a_{ij}=\Pr(X_{n+1}=j|X_n=i)$.
  - 给定某时间的隐状态的条件下，观测的分布矩阵 $B=(b_{i\ell}),b_{i\ell}=b_i(l)=\Pr(Y_n=\ell|X_n=i)$.

该模型在统计模型中有很重要的地位，我们在本课程中就不展开介绍了。

6.5 随机微分方程模型简介

6.5.1 从随机游走到布朗运动

我们考虑一维的随机游走：在一个一维的晶格上，一个小球在格点间跳动，每经过一单位时间，小球就会随机的向左或者向右跳一格，各 50% 的概率。

我们用 X_n 经过 n 步之后所在的格点位置，$X_n\in\mathbb{Z}$。不妨假设 $X_0=0$，即小球从原点出发。

我们观察，随机变量 X_n 可以看作是 n 个独立的随机变量之和，即

$$X_n=\xi_1+\xi_2+\cdots\xi_n,$$

其中，ξ_i 是独立同分布的随机变量，满足

$$\Pr(\xi_i=-1)=\Pr(\xi_i=1)=\frac{1}{2},\quad i=1,\cdots,n.$$

易知，ξ_i 的均值为 $\mu=0$，方差为 $\sigma^2=1$。

如果令 $P_n(m)=\Pr(X_n=m)$，那么易知

$$P_n(m)=\frac{1}{2}P_{n-1}(m-1)+\frac{1}{2}P_{n-1}(m+1).$$

此时，我们可以利用组合数学的知识去求解概率密度函数。当$n=N$ 充分大时，我们由概率的知识（大数定律和中心极限定理）可知，X_N 的概率分布会越来越接近一个均值为 $N\mu$，方差为 $N\sigma^2$ 的高斯分布（即正态分布）。

下面我们考虑一个尺度伸缩。设随机游走的单位时间为时间步长 Δt，晶格上的格点间距为空间步长 Δx，那么我们定义了一个伸缩后的随机游走

$$Y_t^\Delta=\Delta x X_{\frac{t}{\Delta t}},$$

这里，伸缩后单步游走 $\Delta x\xi_i$ 的均值为 $\mu=0$，方差为 $\sigma^2=(\Delta x)^2$。

为了考虑其概率密度函数，我们令

$$u(x,t)=C_\Delta P_{\frac{t}{\Delta t}}\left(\frac{x}{\Delta x}\right).$$

这里，C_Δ 是个跟 Δx 有关的归一化常数。

显然，我们有

$$u(x,t+\Delta t)=\frac{1}{2}u(x-\Delta x,t)+\frac{1}{2}u(x+\Delta x,t).$$

而上式可以改写为

$$\frac{u(x,t+\Delta t)-u(x,t)}{\Delta t}=\frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t}\frac{u(x-\Delta x,t)-2u(x,t)+u(x+\Delta x,t)}{(\Delta x)^2}.$$

虽然我们只是在网格上定义了 $u(x,t)$ 的值，但是不妨假设 $u(x,t)$ 的定义域可以被光滑地延拓到全空间上。

我们考虑一种特殊的网格无限加密过程：如果我们假设 $\Delta x, \Delta t \to 0$ 时满足

$$D = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t},$$

那么至少形式上，我们可以得到 $\Delta t \to 0$ 时， $u(x,t)$ 满足

$$u_t = D u_{xx},$$

这也就是我们熟悉的扩散方程。如果在这种极限下，我们定义

$$Y_t = \lim_{\Delta t \to 0} Y_t^{\Delta} = \lim_{\Delta t \to 0} \Delta x X_{\frac{t}{\Delta t}} = \lim_{\Delta t \to 0} \Delta x \sum_{i=1}^{t/\Delta t} \xi_i.$$

那么这个极限的随机过程 Y_t 的概率密度函数满足上述扩散方程。

那么如何理解这个极限过程 Y_t 呢？

当 $t > 0$ 固定时，由中心极限定理，我们可知 Y_t 服从高斯分布，其均值为

$$\lim_{\Delta t \to 0} N\mu = 0,$$

方差为

$$\lim_{\Delta t \to 0} N\sigma^2 = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{t}{\Delta t}(\Delta x)^2 = 2Dt.$$

所以，Y_t 满足均方位移的性质，即

$$\mathbb{E}(Y_t^2) = 2Dt.$$

我们这里讨论的 Y_t 其实是一种扩散过程。而当 $D = \frac{1}{2}$ 是，这个过程就是布朗运动（Brownian Motion），科学家们也称它为维纳过程(Wiener Process)。

6.5.2 由布朗运动驱动的随机微分方程

我们回顾，在第2章中，我们学习了基于一阶微分方程的变化率模型。事实上，在模型的构成和使用中，随机性是普遍存在。一方面，模型在建立的过程中，不可避免地会存在数学上的简化假设和非第一性原理的经验结论的使用；另一方面，模型中的各类参数通常不能通过严格的数学推导和实验数据建立精准的关系，而且误差和噪声在实验测量中也是无所不在。

有“噪声”的变化率模型（常微分方程）可以写成如下的形式：

$$\frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t} = b(t, X_t) + \sigma(t, X_t)\eta(t).$$

数学上，我们常对噪声 $\eta(t)$ 做如下的假设

1. $\mathbb{E}\eta(t) = 0$，即对于任意固定的时刻，噪声的期望是 0;
2. （*）$\eta(t)$ 是平稳的。平稳的严格定义超出了本课的范围，我们直观的理解为这个随机过程统计特性不随时间的推移而变化;
3. $\mathbb{E}\eta(t)\eta(s) = 0$ if $t \neq s$.

这样的噪声被称为**白噪声**。事实上，可以证明，满足这样的 $\eta(t)$ 是不会有连续的路径的。为了理解这类方程，我们来考虑一个离散的形式：在时间点 $t_0 < t_1 \cdots$，我们令 $X_k = X(t_k)$:

$$X_{k+1} - X_k = b(t_k, X_k)\Delta t_k + \sigma(t_k, X_k)\int_{t_k}^{t_{k+1}} \eta(s)\,\mathrm{d}s. \tag{6.7}$$

我们不妨引入$V_t = V(t)$，使得

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \eta(s)\,\mathrm{d}s = V(t_{k+1}) - V(t_k) =: \Delta V_k. \tag{6.8}$$

根据$\eta(t)$的性质，我们知道$\mathbb{E}V_t = 0$。而且，因为我们希望 X_t 至少是连续的，所以我们要求 V_t 有连续的路径。

事实上，在一定意义下，唯一可能的满足上述条件的过程是布朗运动（Brownian motion, or Wiener process）。我们用 W_t 或者 $W(t,\omega)$ 表示布朗运动，它还满足

1. 初值为 0：$\forall\omega, W(0,\omega) = 0$；
2. 路径连续：$\forall\omega$，$W(t,\omega)$ 是 t 的连续函数；
3. 高斯分布：for $t > s$, $W_t - W_s \sim N(0, t-s)$
4. 独立增量：如果 $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_n < \cdots$，那么 $W_{t_i} - W_{t_{i-1}}$, $i = 1,2,\cdots$ 相互独立。

我们还可以推出一些有用的结论

- $\mathbb{E}W_tW_s = \min(s,t)$。不妨设 $s < t$ 那么

$$\mathbb{E}W_tW_s = \mathbb{E}W_sW_s + \mathbb{E}(W_t - W_s)W_s = s.$$

- 我们考虑随机变量

$$\frac{W_{t+\Delta t} - W_t}{\Delta}.$$

可知它是均值为 0 方差是 $1/\Delta t$ 的高斯变量，其方差在 $\Delta \to 0$ 时发散到无穷。所以，W_t 的传统意义上的时间导数不存在，它的路径时不光滑的。（我们可以在分布的意义下把它的导数定义为白噪声。）

于是，我们可设，

$$X_k = X_0 + \sum_{j=0}^{k-1} b(t_j, X_j)\Delta t_j + \sum_{j=0}^{k-1} \sigma(t_j, X_j)\Delta W_j, \tag{6.9}$$

然后考虑 $\Delta t_j \to 0$ 的极限。假设极限存在，则我们可写成

$$X_t = X_0 + \int_0^t b(s, X_s)\,\mathrm{d}s + \int_0^t \sigma(s, X_s)\,\mathrm{d}W_s, \tag{6.10}$$

或者他的微分形式

$$\mathrm{d}X_t = b(t, X_t)\,\mathrm{d}t + \sigma(t, X_t)\,\mathrm{d}W_t. \tag{6.11}$$

注意，布朗运动 W_t 其实是关于时间不可微的，因此，我们常避免写 $\frac{\mathrm{d}W_t}{\mathrm{d}t}$。虽然事实上，一些人还是会这么写。

我们需要理解在什么意义下，对于哪些随机过程 f，$\int_0^t f\,\mathrm{d}W_s$ 是存在的。因此，我们先考虑如下的积分

$$I = \int_0^t W_s\,\mathrm{d}W_s. \tag{6.12}$$

让我们尝试在 $[k\Delta t, (k+1)\Delta t)$ 等区间上用黎曼积分计算这个积分。我们考虑两种特殊的选择

A. 被积函数在区间的左端点取值

$$I^{(n)} = \sum_{k=0}^{n-1} W_{k\Delta t}\big(W_{(k+1)\Delta t} - W_{k\Delta t}\big), \tag{6.13}$$

于是，我们计算得到

$$\mathbb{E}I^{(n)} = \sum k\Delta t - k\Delta t = 0. \tag{6.14}$$

B. 被积函数在区间的中点取值

$$I^{(n)} = \sum_{k=0}^{n-1} W_{(k+\frac{1}{2})\Delta t}\big(W_{(k+1)\Delta t} - W_{k\Delta t}\big), \tag{6.15}$$

于是我们计算得到

$$\mathbb{E}I^{(n)} = \sum (k+\frac{1}{2})\Delta t - k\Delta t = \frac{t}{2}. \tag{6.16}$$

可见，在不同的逼近选择下，我们得到了不同的极限。所以，黎曼积分是并不存在的。为了解决这个问题，我们需要先决定被积函数在每个区间的逼近方式。这里，有两个常见的选择：

定义 1 *Itô integral* 是黎曼和中被积函数在左端点取值的极限，记为

$$\int_0^t f(s,\omega)\,\mathrm{d}W_s.$$

定义 2 (*) *Stratonovich integral* 是黎曼和中被积函数利用梯形公式取值的极限，即

$$\sum_j \frac{1}{2}\big(f(t_j,\omega) + f(t_{j+1},\omega)\big)\Delta W_j.$$

记为

$$\int_0^t f(s,\omega) \circ \mathrm{d}W_s.$$

在下文中，我们只考虑 Itô integral。注意 $\int_0^t f(s,\omega)\,\mathrm{d}W_s$ 是一个随机变量。这里，我们列举 Itô Calculus 的几个常用的性质，其中前两个是对 Itô integral 的刻画，而最后一个著名的 Itô formula，可以看作是 Itô Calculus 中的链锁法则。

- 对于 Itô integral，我们有如下的一般性结果

$$\mathbb{E}\int_0^t f(s,\omega)\,\mathrm{d}W_s = 0. \tag{6.17}$$

- 对于 Itô integral，我们有如下的 Itô isometry

$$\mathbb{E}\Big(\int_0^t f(s,\omega)\,\mathrm{d}W_s\Big)^2 = \mathbb{E}\int_0^t f(s,\omega)^2\,\mathrm{d}s. \tag{6.18}$$

- Itô formula (Itô lemma):

  Let X_t be the solution to

$$\mathrm{d}X_t = b(t,\omega)\,\mathrm{d}t + \sigma(t,\omega)\,\mathrm{d}W_t$$

  where b, σ are functions of (t,ω). Given $g(t,x) \in C^2([0,\infty)\times\mathbb{R})$. Then $Y_t = g(t,X_t)$ satisfies the equation

$$\mathrm{d}Y_t = \frac{\partial g}{\partial t}(t,X_t)\,\mathrm{d}t + \frac{\partial g}{\partial x}(t,X_t)\,\mathrm{d}X_t + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 g}{\partial x^2}(t,X_t)(\mathrm{d}X_t)^2, \tag{6.19}$$

  where $(\mathrm{d}X_t)^2$ is computed according to the rules

$$\mathrm{d}t\cdot\mathrm{d}t = \mathrm{d}t\cdot\mathrm{d}W_t = \mathrm{d}W_t\cdot\mathrm{d}t = 0, \qquad \mathrm{d}W_t\cdot\mathrm{d}W_t = \mathrm{d}t.$$

例子1. 计算 $\mathrm{d}(\frac{1}{2}W_t^2)$。令 $g(t,x) = \frac{1}{2}x^2$，则

$$\mathrm{d}Y_t = W_t\,\mathrm{d}W_t + \frac{1}{2}(\mathrm{d}W_t)^2 = W_t\,\mathrm{d}W_t + \frac{1}{2}\mathrm{d}t.$$

例子2. Ornstein-Uhlenbeck process. 考虑方程

$$\mathrm{d}X_t = -aX_t\,\mathrm{d}t + \sigma\,\mathrm{d}W_t, \quad X_0 = \xi. \tag{6.20}$$

注意到，右端的第一项代表指数型衰减，而第二项表示“波动”变化。

我们来利用积分因子法求解此问题。方程两边乘以 e^{at}，我们得到

$$\mathrm{d}\left(e^{at}X_t\right) = e^{at}\,\mathrm{d}X_t + ae^{at}X_t\,\mathrm{d}t = \sigma e^{at}\,\mathrm{d}W_t, \tag{6.21}$$

于是，积分得到

$$e^{at}X_t - X_0 = \int_0^t \sigma e^{as}\,\mathrm{d}W_s. \tag{6.22}$$

所以，方程的解是

$$X_t = e^{-at}X_0 + \sigma\int_0^t e^{-a(t-s)}\,\mathrm{d}W_s. \tag{6.23}$$

我们注意到，方程对初值的“记忆”会指数型衰减。并且，我们做如下的计算

- Mean. $\mathbb{E}X_t = e^{-at}\mathbb{E}X_0$ 指数型衰减到 0。
- Variance. (假设初值和 W_t 无关)

$$\begin{aligned}\operatorname{Var}X_t = \mathbb{E}(X_t)^2 - (\mathbb{E}X_t)^2 &= e^{-2at}\left(\mathbb{E}X_0^2 - (\mathbb{E}X_0)^2\right) + \sigma^2\mathbb{E}\left[\left(\int_0^t e^{-a(t-s)}\,\mathrm{d}W_s\right)^2\right] \\ &= e^{-2at}\operatorname{Var}X_0 + \sigma^2\int_0^t e^{-2a(t-s)}\,\mathrm{d}s \\ &= e^{-2at}\operatorname{Var}X_0 + \frac{\sigma^2}{2a}\left(1 - e^{-2at}\right).\end{aligned}$$

特别的，我们注意到 $\lim_{t\to\infty}\operatorname{Var}X_t = \frac{\sigma^2}{2a}$.

6.5.3 更多的例子*

例子3. Geometric Brownian motion. 考虑方程

$$\mathrm{d}N_t = rN_t\,\mathrm{d}t + \alpha N_t\,\mathrm{d}W_t. \tag{6.24}$$

这是另外一个人口增长模型，这里 r 是（相对）增长系数，α 是波动系数。这个例子也跟金融数学里面的Black-Scholes model 有关。这个意义下， N_t 可以理解称资产的定价，α 可以理解为波动性。

为了求解此方程，我们在两端除以N_t，便得到

$$\frac{\mathrm{d}N_t}{N_t} = r\,\mathrm{d}t + \alpha\,\mathrm{d}W_t. \tag{6.25}$$

注意，利用 Itô formula，我们有

$$\mathrm{d}(\log N_t) = \frac{1}{N_t}\,\mathrm{d}N_t - \frac{1}{2N_t^2}(\mathrm{d}N_t)^2 = \frac{1}{N_t}\,\mathrm{d}N_t - \frac{\alpha^2}{2}\,\mathrm{d}t. \tag{6.26}$$

于是我们得到，

$$\mathrm{d}(\log N_t) = \left(r - \frac{\alpha^2}{2}\right)\mathrm{d}t + \alpha\,\mathrm{d}W_t, \tag{6.27}$$

容易得出方程的解

$$N_t = N_0 e^{(r-\frac{\alpha^2}{2})t + \alpha W_t}. \tag{6.28}$$

接下来，我们来计算一下解的均值（期望）。注意到，问题的关键在于求 $Y_t := e^{\alpha W_t}$ 的均值。利用 Itô formula，我们有

$$\mathrm{d}Y_t = \alpha e^{\alpha W_t}\,\mathrm{d}W_t + \frac{\alpha^2}{2}e^{\alpha W_t}\,\mathrm{d}t = \alpha Y_t\,\mathrm{d}W_t + \frac{\alpha^2}{2}Y_t\,\mathrm{d}t, \tag{6.29}$$

两边积分，并求期望，我们得到

$$\mathbb{E}Y_t = \mathbb{E}Y_0 + \frac{\alpha^2}{2}\int_0^t \mathbb{E}Y_s\,\mathrm{d}s, \tag{6.30}$$

于是有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbb{E}Y_t = \frac{\alpha^2}{2}\mathbb{E}Y_t. \tag{6.31}$$

显然，$\mathbb{E}Y_0 = 1$，于是我们有$\mathbb{E}Y_t = e^{\frac{\alpha^2}{2}t}$。

最终，我们得到，

$$\mathbb{E}N_t = (\mathbb{E}N_0)e^{rt},$$

也就是说，人口数量期望的增长和变化率模型的人口增长是一样的。（注意，按照第二章的模型建立方法，我们有简单的没有随机因素的人口增长模型 $\dot{N} = rN.$ ）

6.5.4 Fokker-Planck equation

最后，我们换一个角度看随机微分方程。我们考虑 X_t 满足

$$\mathrm{d}X_t = b(t, X_t)\,\mathrm{d}t + \sigma(t, X_t)\,\mathrm{d}W_t. \tag{6.32}$$

注意，对于固定的 t，X_t 是一个随机变量，我们令它的概率密度函数为 $\rho(x,t)$，那么已知了 X_t 的时间演化，我们如何得到 $\rho(x,t)$ 的时间演化呢？

我们先回忆一下，在第三章的 Reynolds Transport Theorem （或者第一章的守恒律模型），如果 $\sigma \equiv 0$，则 X_t 的方程退化成一个确定的特征线方程

$$\mathrm{d}X_t = b(t, X_t)\,\mathrm{d}t. \tag{6.33}$$

我们知道，这时候密度函数 $\rho(x,t)$ 满足连续性方程

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t,x) + \frac{\partial}{\partial x}\big(b(x)\rho(t,x)\big) = 0. \tag{6.34}$$

那么噪声对密度函数的演化产生了什么影响呢？下面只给出一个形式上的推导。考虑任何一个光滑函数 $g(x)$, 由 Ito's formula，我们有

$$\begin{aligned}\mathrm{d}g(X_t) &= \frac{\partial g(X_t)}{\partial x}\,\mathrm{d}X_t + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 g(X_t)}{\partial x^2}\sigma(X_t)^2\,\mathrm{d}t \\ &= \left(\frac{\partial g(X_t)}{\partial x}b(X_t) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 g(X_t)}{\partial x^2}\sigma(X_t)^2\right)\mathrm{d}t + \frac{\partial g(X_t)}{\partial x}\sigma(X_t)\,\mathrm{d}W_t.\end{aligned} \tag{6.35}$$

通过取期望，我们得到

$$\mathrm{d}\mathbb{E}g(X_t) = \mathbb{E}\left(\frac{\partial g(X_t)}{\partial x}b(X_t) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 g(X_t)}{\partial x^2}\sigma(X_t)^2\right)\mathrm{d}t. \tag{6.36}$$

利用，概率密度函数 $\rho(x,t)$，可以把上式表达为

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\int \rho(t,x)g(x)\,\mathrm{d}x &= \int \left(g'(x)b(x) + \frac{1}{2}g''(x)\sigma(x)^2\right)\rho(t,x)\,\mathrm{d}x \\ &= \int g(x)\left(-\frac{\partial}{\partial x}\big(b(x)\rho(t,x)\big) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\big(\sigma^2(x)\rho(t,x)\big)\right)\mathrm{d}x.\end{aligned} \tag{6.37}$$

如果我们把 $g(x)$ 看作一个试验函数，由 g 的任意性，我们得到

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t,x) = -\frac{\partial}{\partial x}\big(b(x)\rho(t,x)\big) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\big(\sigma^2(x)\rho(t,x)\big). \tag{6.38}$$

这就是所谓的 forward Kolmogorov equation，又叫做 Fokker-Planck equation。

我们注意到，Fokker-Planck equation 其实是一种对流扩散方程。下面观察一些特例：

- 如果没有随机微分方程没有噪声项的话（即 $\sigma = 0$，随机微分方程变成了常微分方程），那么 Fokker-Planck equation 其实退化成了第一章（或者第三章）的守恒律方程。
- 而微观运动中的噪声项引入了密度函数的扩散项。特别的，如果 $b \equiv 0$ 而 $\sigma = \sqrt{2\beta}$，则 Fokker-Planck equation 变成了我们熟悉的扩散方程

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t,x) = \beta\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(t,x).$$

6.6 随机最优控制简介*

在第4章的末尾，我们介绍了对于确定性变化率模型的最优控制。而如果状态函数 $y(s;\omega)$（简记为 $y(s)$）是一个随机过程，那么控制也是随机的。我们考虑一个一维的状态函数 $y(s):[t,T]\times\Omega\to\mathbb{R}$，它的演化满足如下随机微分方程

$$\begin{aligned}&\mathrm{d}y(s) = f(y(s),\alpha(s))\,\mathrm{d}t + \sigma(y(s),\alpha(s))\,\mathrm{d}W_s, \quad s\in[t,T].\\ &y(t) = x\in\mathbb{R}.\end{aligned}$$

这里，$\alpha(s)\in\mathbb{R}$ 是控制函数，W_t 是一维的布朗运动，我们用 $\mathscr{A}$ 来表示所有可行控制的集合。

类似于确定性的情形，考虑如下的收益泛函

$$J_{x,t}(\alpha) = \int_t^T r(y(s),\alpha(s))ds + g(y(T)).$$

其中，$g(x):\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$ 代表了终止时刻的收益，而 $r(x,\alpha):\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^m\to\mathbb{R}$ 代表了过程中的收益。注意，与确定性的情形不同，由于状态是随机过程，这里的收益函数也是一个随机变量。

为了找到不同 x 和 t 对应的最佳收益，我们定义此控制问题的价值函数

$$u(x,t) = \max_{\alpha(\cdot)\in\mathscr{A}}\mathbb{E}\left[\int_t^T r(y(s),\alpha(s))ds + g(y(T))\,\middle|\,y(t)=x\right].$$

显然，$u(x,T) = g(x)$，即我们限定了价值函数的终态条件。

为了求解终止时刻之前的价值函数 $u(x,t)$，我们需要下面的随机控制版本的**动态规划原理（Dynamic Programming Principle，简称DPP）**：

定理. 令 $u(x,t)$ 为如上定义的价值函数，那么当 $t<\tau\le T$ 时，我们有

$$u(x,t) = \max_{\alpha(\cdot)\in\mathscr{A}}\mathbb{E}\left[\int_t^\tau r(y(s),\alpha(s))ds + u(y(\tau),\tau)\,\middle|\,y(t)=x\right].$$

我们略过这定理的证明（感兴趣的同学可以自行查找）。

注意到 $u(y(t),t)$ 是一个随机过程，那么由 Itô formula，我们有

$$\begin{aligned}\mathrm{d}u &= u_t\,\mathrm{d}t + u_y\,\mathrm{d}y + \frac{1}{2}u_{yy}(\mathrm{d}y)^2\\ &= \left(u_t + fu_y + \frac{1}{2}\sigma^2u_{yy}\right)\mathrm{d}t + \sigma u_y\,\mathrm{d}W_t.\end{aligned}$$

对上式在 $[t,\tau]$ 上积分，我们得（注意条件 $y(t)=x$）

$$u(y(\tau),\tau)-u(x,t)=\int_t^\tau\left(u_t+fu_y+\frac{1}{2}\sigma^2u_{yy}\right)\mathrm{d}s+\int_t^\tau\sigma u_y\mathrm{d}W_s.$$

我们再将上式带入 DPP 的公式中，就得到

$$0=\max_{\alpha(\cdot)\in\mathscr{A}}\mathbb{E}\left[\int_t^\tau r(y(s),\alpha(s))ds+\int_t^\tau\left(u_t+fu_y+\frac{1}{2}\sigma^2u_{yy}\right)\mathrm{d}s\middle|y(t)=x\right].$$

于是，类似于确定性的情况，我们令 $\tau=t+h$，再令 $h\to0+$，我们推导出了Hamilton-Jacobi-Bellman （HJB）方程

$$u_t(x,t)+\max_{\alpha\in A}\left[r(x,\alpha)+f(x,\alpha)u_x(x,t)+\frac{1}{2}\sigma^2(x,\alpha)u_{xx}(x,t)\right]=0,\quad x\in\mathbb{R},\ t<T.$$

此方程的解要满足终态条件 $u(x,T)=g(x)$。