化学反应网络的耦合扩散过程的样本轨道构造及数值算法

献给钱敏教授 90 华诞

丁少杰, 何国龙, 张雪娟*

浙江师范大学数理与信息工程学院, 金华 321004

E-mail: talkingsmall@126.com, glhe@zjnu.cn, xuejuanzhang@gmail.com

收稿日期: 2017-07-12; 接受日期: 2017-09-16; 网络出版日期: 2017-11-13; * 通信作者

国家自然科学基金 (批准号: 61271396) 和浙江省杰出青年基金 (批准号: LR13A05000) 资助项目

摘要 耦合扩散过程是一个耦合了扩散运动和随机跳过程的混合系统. 为解决这类系统的样本轨道模拟问题, 本文在一个由 $[0, 1]^\infty$ 上的 Lebesgue 测度空间与 $\mathcal{C}(\mathbb{R}_+, \mathbb{R}^r)$ 上的 Wiener 测度空间所形成的乘积空间中对耦合扩散过程的轨道进行了构造, 并证明了构造得到的过程具有 Markov 性, 给出了剩余寿命及下次反应序号的分布函数, 进一步考察了过程的无穷小生成元与鞅问题, 在分布意义下证明了鞅问题的唯一性. 最后, 根据构造得到的样本轨道, 给出了耦合扩散过程的数值模拟方法.

关键词 耦合扩散过程 样本轨道构造 剩余寿命分布 鞅问题

MSC (2010) 主题分类 60G20, 60H35

1 引言

化学反应动力学通常用一个描述分子浓度演化的常微分方程组来建模, 然而对于许多细胞尺度下的化学反应系统, 由于参与反应的分子数相对稀少, 系统通常会出现一些确定性系统观察不到的随机涨落现象. 在这种情形下, 就需要随机的离散系统模型来描述反应中各种物质的分子数演化. 当反应网络具有固定反应速率常数时, Gillespie^[1,2] 于 1976 年提出了精确的数值模拟算法 (常被称为 Gillespie 算法或 SSA), 该方法在生物化学领域得到了广泛的应用, 并引起了人们对随机算法的深入研究, 并发展出一系列的改进算法来提高计算效率, 例如, 能够节约随机数的精确算法—下一步反应法 (next reaction method)^[3,4], 能一步模拟多个反应的近似算法—tau-leaping 算法^[5-8] 及用于处理系统具有快慢时间尺度的混合算法^[9-14].

在神经科学领域, 随着 Neher 和 Sakmann 膜片钳 (patch-clamp) 技术^[15] 的发明, 确定性 Hodgkin-Huxley (HH) 神经元模型^[16] 被推广为一个既有宏观膜电位连续演化又有离子通道随机开关的随机 HH 模型^[17,18]. 在这一系统中, 离子通道状态转换的速率是膜电位门控的, 反过来膜电位的演化也依赖于反应网络中处于开放状态的离子通道数^[19], 因此, 这是一个典型的随机混合系统. 当膜电位演化方程

英文引用格式: Ding S J, He G L, Zhang X J. Construction of sampling trajectories of coupled diffusion processes and its simulation algorithm (in Chinese). Sci Sin Math, 2017, 47: 1809–1830, doi: 10.1360/N012017-00155

不含 Gauss 噪声驱动的扩散项时, 随机 HH 神经元模型归结为一个逐段决定的 Markov 过程 (piecewise deterministic Markov process, PDMP). PDMP 的数学理论在 20 世纪 80 年代由 Davis^[20] 系统地建立起来, 并于 20 世纪 90 年代又对 PDMP 的定义有所修正, 拓宽了 PDMP 的应用范围 (参见文献 [21]). Hou 和 Liu^[22] 对 PDMP 进一步做了推广, 提出了广义 PDMP、逐段决定的 Markov 骨架过程和 Markov 骨架过程. 当膜电位演化方程含有 Gauss 噪声驱动的扩散项时, 随机 HH 神经元模型则归结为一个耦合扩散过程, 这也是对 PDMP 的一个直接推广. 早在 20 世纪 80 年代, 文献 [23–25] 从椭圆型算子的半群构造问题出发, 提出了耦合扩散过程 (coupled diffusion process). Yin 和 Zhu^[26] 在他们的专著中也称该过程为依状态切换的随机微分方程 (hybrid switching process). 这类过程也可以从其他方法得到, 例如, Bensoussan 和 Lions^[27] 从 Hamilton-Jacobi-Bellman 方程的最优随机控制问题出发来得到过程; Skorokhod^[28] 从含有 Poisson 随机测度的微分方程出发来得到过程. 对耦合扩散过程的理论研究, 章复熹^[29] 及 Qian 和 Zhang^[30] 通过求偏微分方程的局部解给出了最小耦合扩散过程的构造, 并从熵产生、过程的可逆性等建立了耦合扩散过程的的非平衡态理论. 文献 [26, 31] 研究了该类过程的解的存在唯一性和稳定性.

需要指出的是, 要使耦合扩散过程模型广泛应用于自然科学和其他领域, 就必须较好地解决其样本轨道的数值模拟问题. PDMP 由于其直观的构造方式 (参见文献 [20, 21]), 较容易得到其理想化的精确数值模拟算法. Chow 和 White^[32] 于 1996 年将 Gillespie 算法推广到不带扩散项的随机 HH 模型中; 考虑到 Chow 和 White 提出的算法使样本轨道失去了 Markov 性, Anderson 等^[33] 于 2015 年给出了基于解击中时的跳适应的下步反应方法; Ding 等^[34] 于 2016 年通过对相邻跳跃间隔时间的对数生存函数进行线性插值, 进一步节约了随机数的使用并改进了算法的精度. 相比之下, 现有耦合扩散过程的构造方式过于抽象, 难以形成理想化的精确数值算法. 因而, 本文类比文献 [20, 34] 中 PDMP 的定义及构造方法, 在一个由 $[0, 1]^\infty$ 上的 Lebesgue 测度空间与 $\mathcal{C}(\mathbb{R}_+, \mathbb{R}^r)$ 上的 Wiener 测度空间所形成的乘积空间中构造耦合扩散过程的样本轨道, 从而将 Gillespie 算法推广到耦合扩散过程, 得到理想化的精确数值模拟算法.

2 主要结论

2.1 过程的构造

考虑一个由 p 种物质 $S_1, \dots, S_p$ 通过 q 种反应 $R_1, \dots, R_q$ 形成的化学反应网络. 令 $X(t) = (X_1(t), \dots, X_p(t))^T$ 表示该系统的分子个数变量, 其中 $X_i(t)$ 表示 S_i 在 t 时刻的分子个数. 每个 R_j 对应如下的反应方程式:

$$R_j : \sum_{i=1}^p \nu_{i,j}^- S_i \xrightarrow{c_j(V(t))} \sum_{i=1}^p \nu_{i,j}^+ S_i, \quad (2.1)$$

其中 $\nu_j^- = (\nu_{1,j}^-, \dots, \nu_{p,j}^-)^T$, $\nu_j^+ = (\nu_{1,j}^+, \dots, \nu_{p,j}^+)^T$ 为 $\mathbb{N}^p$ 上的非零向量且 $\nu_j^- \neq \nu_j^+$, $c_j(V(t))$ 是依赖于 d 维过程 $V(t)$ 的反应速率常数, 并要求 $c_j : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ 非负连续. 这样, 定义 R_j 的反应速率¹⁾

$$\lambda_j(x, v) = c_j(v) \prod_{i=1}^p \binom{x_i}{\nu_{i,j}^-}, \quad x = (x_1, \dots, x_p)^T \in \mathbb{Z}^p, \quad v \in \mathbb{R}^d. \quad (2.2)$$

¹⁾ $\binom{m}{n}$ 表示从 m 个不同元素取出 n 个元素的组合数, 其中当 $m \geq n \geq 0$ 时, $\binom{m}{n} = \frac{m!}{(n-m)!n!}$; 否则, $\binom{m}{n} = 0$.

令 $T_0 = t_0$, $T_{k+1} = \inf\{t > T_k : X(t) \neq X(t^-)\}$, 则当 $t \in [T_{k-1}, T_k)$ 时, $X(t)$ 保持不变, 而 $V(t)$ 的演化满足

$$dV(t) = f(X(t), V(t))dt + g(X(t), V(t))dW(t),$$

其中 $\{W(t); t \in \mathbb{R}\}$ 是 r 维标准 Wiener 过程, $f: \mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$, $g: \mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d \times r}$ 均可测, 并且

$$f(x, v) = (f_1(x, v), \dots, f_d(x, v))^T, \quad g(x, v) = (g_{i,j}(x, v))_{d \times r}$$

关于 v 满足 Lipschitz 条件, 即对任给的 $x \in \mathbb{Z}^p$, 存在依赖于 x 的正常数 L_x , 使得对所有 $v, v' \in \mathbb{R}^d$, 有

$$\sqrt{\sum_{i=1}^d |f_i(x, v) - f_i(x, v')|^2} + \sqrt{\sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^r |g_{i,j}(x, v) - g_{i,j}(x, v')|^2} \leq L_x \sqrt{\sum_{i=1}^d |v_i - v'_i|^2};$$

而当 $t = T_k$ 时, 若发生反应 R_j , 则有跳跃 $X(T_k) = X(T_k^-) + \nu_j$, 其中 $\nu_j = \nu_j^+ - \nu_j^-$ 是反应 R_j 的状态改变向量. 这种跳跃行为的概率分布满足

$$P(N_j(t+h) - N_j(t) = 1 \mid (X(t), V(t)) = (x, v)) = \lambda_j(x, v)h + o(h), \quad h \rightarrow 0^+,$$

$$P(N(t+h) - N(t) \geq 2 \mid (X(t), V(t)) = (x, v)) = o(h), \quad h \rightarrow 0^+,$$

其中 $N(t)$ 和 $N_j(t)$ 分别是 $(t_0, t]$ 中总反应和反应 R_j 的发生次数.

下面考虑将上述过程 $\{(X(t), V(t)); t \geq t_0\}$ 在一个特定的概率空间 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P})$ 上进行构造, 其中该概率空间为 $[0, 1]^\infty$ 上的 Lebesgue 测度空间与 $\mathcal{C}(\mathbb{R}_+, \mathbb{R}^r)$ 上的 Wiener 测度空间所形成的乘积空间, $\mathbb{P}$ 是该乘积空间上的概率测度. 对任意 $\omega = (u, w) \in \Omega$, 其中 $u = (u_1, u_2, \dots) \in [0, 1]^\infty$, $w = w(\cdot) \in \mathcal{C}(\mathbb{R}_+, \mathbb{R}^r)$, 分别定义

$$U(\omega) = u, \quad W(t, \omega) = w(t)$$

为 $[0, 1]^\infty$ 上的 Lebesgue 测度空间上的独立的均匀分布的随机变量序列和 $\mathcal{C}(\mathbb{R}_+, \mathbb{R}^r)$ 上的 Wiener 测度空间上的 r 维标准 Brown 运动.

对 $k \in \mathbb{N}_+$, 记

$$I_{1,k}(\omega) = u_{2k-1}, \quad I_{2,k}(\omega) = u_{2k},$$

另记

$$Z_k(\omega) = (X_k(\omega), V_k(\omega)), \quad \lambda(x, v) = \sum_{j=1}^q \lambda_j(x, v).$$

并设初始条件 $T_0(\omega) = t_0 \in \mathbb{R}$, $X_0(\omega) = x_0 \in \mathbb{N}^p$, $V_0(\omega) = v_0 \in \mathbb{R}^d$.

对任意 $k \in \mathbb{N}_+$, 若 $T_{k-1}(\omega) < +\infty$, 我们按如下规则进行迭代:

(i) $T_k(\omega) = T_{k-1}(\omega) + S_k(\omega)$, 其中

$$S_k(\omega) = \inf \left\{ s \geq 0 : \int_0^s \lambda(X_{k-1}(\omega), \Phi_{X_{k-1}(\omega)}(T_{k-1}(\omega) + h, \omega; V_{k-1}(\omega), T_{k-1}(\omega))) dh \geq -\ln I_{1,k}(\omega) \right\}, \quad (2.3)$$

当 $\inf$ 后的集合为空集时, 补充定义 $S_k(\omega) = +\infty$; 而 $\Phi_x(h, \omega; v, t)$ 是随机微分方程

$$\begin{cases} dU(h, \omega) = f(x, U(h, \omega))dh + g(x, U(h, \omega))dW(h, \omega), \\ U(t, \omega) = v \end{cases} \quad (2.4)$$

t 时刻从 v 出发的唯一解.

(ii) 对 $t \in [T_{k-1}(\omega), T_k(\omega))$, 系统没有发生状态切换, 只进行扩散运动, 则

$$X(t, \omega) = X_{k-1}(\omega), \quad V(t, \omega) = \Phi_{X_{k-1}(\omega)}(t, \omega; V_{k-1}(\omega), T_{k-1}(\omega)).$$

(iii) 对 $t = T_k(\omega)$, 此时系统需要更新状态, 则

$$\begin{cases} X_k(\omega) = X(T_k(\omega), \omega) = X_{k-1}(\omega) + \nu_{J_k(\omega)}, \\ V_k(\omega) = V(T_k(\omega), \omega) = \Phi_{X_{k-1}(\omega)}(T_k(\omega), \omega; V_{k-1}(\omega), T_{k-1}(\omega)), \end{cases} \quad (2.5)$$

其中

$$J_k(\omega) = \min \left\{ j \in \{1, \dots, q\} : I_{2,k}(\omega) \leq \sum_{l=1}^j \frac{\lambda_l(X_{k-1}(\omega), V_k(\omega))}{\lambda(X_{k-1}(\omega), V_k(\omega))} \right\}. \quad (2.6)$$

特别地, 若有 $k \in \mathbb{N}_+$, 使得 $T_k(\omega) = +\infty$, 则规定 $T_l(\omega) = +\infty$, $l > k$; 定义 $T_\infty \triangleq \lim_{k \rightarrow \infty} T_k$, 若 $T_\infty(\omega) < +\infty$, 则定义 $Z_t(\omega) = \partial$, $t \geq T_\infty$, 其中 ∂ (称为“死”状态) 与 $\mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d$ 孤立, 并规定对任意 $\varphi: \mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ 有 $\varphi(\partial) = 0$. 这样, 由上述迭代便得到过程

$$\{Z(t, \omega) = (X(t, \omega), V(t, \omega)); t \geq t_0\}.$$

不难看出 $I_{1,1}, I_{2,1}, \dots, I_{1,k}, I_{2,k}, \dots$ 是 $[0, 1]$ 上独立的均匀分布的随机序列并与 $\sigma(W(t); t \in \mathbb{R})$ 独立. 从而, 由文献 [35, 定理 8.12'] 可知, $\Phi_x(h, \omega; v, t)$ ($h \in [t, +\infty)$) 在 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P})$ 上具有轨道意义下的存在唯一性. 以下为简单起见, 简记 $\Phi_x(h, \omega; v, t)$ 为 $\Phi_x(h; v, t)$.

引理 1 对任意 $k \in \mathbb{N}$, 令 $W^{(k)}(s) = W(T_k + s) - W(T_k)$ ($s \geq 0$) 及 $\mathbb{P}_k(A) = \mathbb{P}(A \mid T_k < \infty)$, $\forall A \in \mathfrak{F}$, 则 $Z(t)\chi_{\{t \leq T_k\}}$ 在 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P})$ 上唯一确定, 并且, 若 $\mathbb{P}(T_k < +\infty) > 0$, 则 $W^{(k)}(s)$ ($s \geq 0$) 是 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P}_k)$ 上与 Z_k 独立的 Wiener 过程.

证明 利用数学归纳法证明上述结论. 当 $k = 0$ 时, $T_0 = t_0$ 和 $Z_0 = (x_0, v_0)$ 均为常量, 而 $\mathbb{P}_0 = \mathbb{P}$, 则 $Z(t)\chi_{\{t \leq T_0\}}$ 显然存在唯一, 并且 $W^{(0)}(s) = W(t_0 + s) - W(t_0)$ 是 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P}_0)$ 上的 Wiener 过程 (参见文献 [35, 命题 5.2]), 即所证命题对 $k = 0$ 成立.

假设所证命题对 $k-1$ ($k \in \mathbb{N}_+$) 成立. 若 $\mathbb{P}(T_{k-1} < +\infty) = 0$, 则 $T_{k-1} = T_k = +\infty$, a.s., 显然有 $Z(t)\chi_{\{t \leq T_k\}}$ 在 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P})$ 上存在唯一. 若 $\mathbb{P}(T_{k-1} < +\infty) > 0$, 则 $W^{(k-1)}(s)$ 是 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P}_{k-1})$ 上与 Z_{k-1} 独立的 Wiener 过程, 而由 (2.4) 可知, $\Phi_{X_{k-1}}(T_{k-1} + s; V_{k-1}, T_{k-1})$ 是

$$U(s) = V_{k-1} + \int_0^s f(X_{k-1}, U(h))dh + \int_0^s g(X_{k-1}, U(h))dW^{(k-1)}(h) \quad (2.7)$$

的解. 由文献 [35, 定理 8.12'] 可知, 方程 (2.7) 在 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P}_{k-1})$ 上有轨道意义下的唯一全局解. 这便说明 $\Phi_{X_{k-1}}(T_{k-1} + s; V_{k-1}, T_{k-1})$ 在 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P})$ 上存在唯一, 从而由 (2.3) 和 (2.5) 可知, 若 $\mathbb{P}(T_{k-1} < +\infty) > 0$, 则 $Z(t)\chi_{\{t \leq T_k\}}$ 在 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P})$ 上存在唯一, 即证得 $Z(t)\chi_{\{T_k < +\infty\}}$ 在 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P})$ 上存在唯一.

下证: 若 $\mathbb{P}(T_k < +\infty) > 0$, 则 $W^{(k)}(s)$ ($s \geq 0$) 是 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P}_k)$ 上与 Z_k 独立的 Wiener 过程. 令 $\mathbb{P}(T_k < +\infty) > 0$. 注意到

$$W^{(k)}(s) = W^{(k-1)}(s + S_k) - W^{(k-1)}(S_k).$$

而由随机微分方程解的性质 (参见文献 [35, 定理 8.12']) 可知, $\Phi_{X_{k-1}}(T_{k-1} + s; V_{k-1}, T_{k-1})$ 关于 $\sigma(Z_{k-1}, \{W^{(k-1)}(h); h \in [0, s]\})$ 适应. 故结合 (2.3) 可知, 对任意 $s \geq 0$, 有

$$\{S_k \leq s\} = \left\{ \int_0^s \lambda(X_{k-1}, \Phi_{X_{k-1}}(T_{k-1} + h; V_{k-1}, T_{k-1}))dh \leq -\ln I_{1,k} \right\}$$

$$\in \sigma(Z_{k-1}, I_{1,k}, \{W^{(k-1)}(h); h \in [0, s]\}),$$

故 S_k 是 $\sigma(Z_{k-1}, I_{1,k}, \{W^{(k-1)}(h); h \in [0, s]\})$ - 停时. 又注意到

$$\sigma(W^{(k-1)}(h); h \in [0, s]) \subseteq \sigma(\{W(t); t \in \mathbb{R}\}, I_{1,1}, I_{2,1}, \dots, I_{1,k-1}, I_{2,k-1}),$$

故 $I_{1,k}$ 也与 $\sigma(W^{(k-1)}(h); h \in [0, s])$ 独立. 另外, $\mathbb{P}_{k-1}$ 对 $\{S_k < +\infty\}$ 的条件概率即为 $\mathbb{P}_k$. 事实上, 对任意 $A \in \mathfrak{F}$, 有

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{k-1}(A \mid S_k < +\infty) &= \frac{\mathbb{P}_{k-1}(A \cap \{S_k < +\infty\})}{\mathbb{P}_{k-1}(S_k < +\infty)} = \frac{\mathbb{P}(A \cap \{S_k < +\infty\} \mid T_{k-1} < +\infty)}{\mathbb{P}(S_k < +\infty \mid T_{k-1} < +\infty)} \\ &= \frac{\mathbb{P}(A \cap \{S_k < +\infty, T_{k-1} < +\infty\})}{\mathbb{P}(S_k < +\infty, T_{k-1} < +\infty)} = \frac{\mathbb{P}(A \cap \{T_k < +\infty\})}{\mathbb{P}(T_k < +\infty)} \\ &= \mathbb{P}_k(A). \end{aligned}$$

这样, 由 Wiener 过程的强再生性 (参见文献 [35, 定理 5.15]) 可知, $W^{(k)}(s)$ 是 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P}_k)$ 上与

$$\sigma(Z_{k-1}, I_{1,k}, \{W^{(k-1)}(s \wedge S_k), s \geq 0\})$$

独立的 Wiener 过程. 而由 (2.5) 可知, Z_k 为 $\sigma(Z_{k-1}, I_{1,k}, I_{2,k}, \{W^{(k-1)}(s \wedge S_k); s \geq 0\})$ - 可测, 所以, $W^{(k)}(s)$ 与 Z_k 独立. 此时, 可总结得到所证结论对 k 也成立. 证明完毕. $\square$

定理 1 由上述迭代所得过程 $Z(t)$ 在 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P})$ 上具有轨道意义下的存在唯一性.

证明 由引理 1 得, 对任意 $k \in \mathbb{N}$, $Z(t)\chi_{\{t \leq T_k\}}$ 唯一确定. 这意味着 $Z(t)\chi_{\{t \leq T_\infty\}}$ 在 $(\Omega, \mathfrak{F}, \mathbb{P})$ 上唯一确定. 结合对 $\omega \in \{T_\infty < +\infty\}$ 情形的补充定义, 便可总结得到 $Z(t)$ 具有轨道意义下的存在唯一性. 证明完毕. $\square$

2.2 过程的剩余寿命与下次反应序号

下面将概率测度 $\mathbb{P}$ 导出的数学期望记为 $\mathbb{E}$. 令 $N(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \chi_{[T_k, +\infty)}(t)$ 表示 $[t_0, t]$ 上反应网络发生状态切换的次数, 这样 $\gamma(t) = T_{N(t)+1} - t$ 和 $\eta(t) = J_{N(t)+1}$ 表示 t 时刻 $Z(t)$ 所处状态的剩余寿命和下次反应序号. 另外, 将 $Z(t)$ 的自然 σ - 代数流记为 $\mathfrak{F}_t^Z$, 即 $\mathfrak{F}_t^Z = \sigma(Z(h); h \in [0, t])$, 并定义如下 σ - 代数流:

$$\mathfrak{F}_t = \sigma(\mathfrak{F}_t^Z, \{W(h); h \in [t_0, t]\}), \quad \widehat{\mathfrak{F}}_t = \sigma(\mathfrak{F}_t^Z, \{W(h); h \geq t_0\}),$$

以及

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{k,t} &= \begin{cases} \sigma(\{W(h \wedge t); h \in \mathbb{R}\}), & \text{若 } k = 0, \\ \sigma(\{(I_{1,l}, I_{2,l})\}_{l=1}^k, \{W(h \wedge t); h \in \mathbb{R}\}), & \text{若 } k \in \mathbb{N}_+, \end{cases} \\ \mathcal{N}_{k,t} &= \begin{cases} \sigma(I_{1,1}, \{W(h \wedge t); h \in \mathbb{R}\}), & \text{若 } k = 1, \\ \sigma(\{(I_{1,l}, I_{2,l})\}_{l=1}^{k-1}, I_{1,k}, \{W(h \wedge t); h \in \mathbb{R}\}), & \text{若 } k \geq 2 \text{ 且 } k \in \mathbb{N}, \end{cases} \end{aligned}$$

不难看出, 对任意 $k \in \mathbb{N}_+$, $t \geq t_0$ 及 $s \geq 0$, 有

$$\mathcal{M}_{k,t} \subseteq \mathcal{M}_{k+1,t}, \quad \mathcal{N}_{k,t} \subseteq \mathcal{N}_{k+1,t}, \quad \mathcal{M}_{k,t} \subseteq \mathcal{M}_{k,t+s}, \quad \mathcal{N}_{k,t} \subseteq \mathcal{N}_{k,t+s}, \quad \mathcal{M}_{k-1,t} \subseteq \mathcal{N}_{k,t} \subseteq \mathcal{M}_{k,t},$$

而 T_k 是 $\mathfrak{F}_t^Z$ - 停时, 这是因为 $\{T_k \leq t\} = \{N(t) \geq k\}$, 而由 (2.3)–(2.6) 可知, $Z(t)$ 样本轨道的不连续点为所有 T_k , 从而有

$$N(t) = \sum_{t_0 \leq h \leq t} \chi_{\{Z(h) \neq Z(h-)\}}.$$

引理 2 T_k 是 $\mathcal{N}_{k,t}$ - 停时, 并且 V_k 对 $\mathcal{N}_{k,T_k}$ 可测, 而 X_k 和 Z_k 对 $\mathcal{M}_{k,T_k}$ 可测.

证明 在 $k=0$ 时, $T_0 = t_0$, $Z_0 = (x_0, v_0)$ 为常量, 该结论自然成立. 下面证明当该结论对 k 成立时, 它对 $k+1$ 也成立. 由 (2.3) 可得

$$\begin{aligned} T_{k+1} &= \inf \left\{ t \geq T_k : \int_{T_k}^t \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(h; V_k, T_k)) dh \geq -\ln I_{1,k+1} \right\} \\ &= \inf \left\{ t \geq T_k : \int_{t_0}^t \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(h; V_k, T_k)) \chi_{\{T_k \leq h\}} dh \geq -\ln I_{1,k+1} \right\}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

由假设 Z_k 对 $\mathcal{M}_{k,T_k}$ 可测, T_k 是 $\mathcal{N}_{k,t}$ - 停时, 而 $\mathcal{N}_{k,t} \subseteq \mathcal{M}_{k,t}$, 则对任给的 $t \geq t_0$, $\Phi_{X_k}(t; V_k, T_k) \chi_{\{T_k \leq t\}}$ 对 $\mathcal{M}_{k,t}$ 可测, 故

$$\{T_{k+1} \leq t\} = \left\{ \int_{t_0}^t \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(h; V_k, T_k)) \chi_{\{T_k \leq h\}} dh \leq -\ln I_{1,k+1} \right\} \in \mathcal{N}_{k+1,t},$$

即 T_{k+1} 是一个 $\mathcal{N}_{k+1,t}$ - 停时. 另外, 由于

$$V_{k+1} = \Phi_{X_k}(T_{k+1}; V_k, T_k),$$

故 V_{k+1} 对 $\sigma(\mathcal{N}_{k,T_k}, I_{1,k+1}, \{W(h \wedge T_{k+1}); h \in \mathbb{R}\})$ 可测, 而 $T_k \leq T_{k+1}$ 意味着 $\mathcal{N}_{k,T_k} \subseteq \mathcal{N}_{k+1,T_{k+1}}$. 因此, V_{k+1} 对 $\mathcal{N}_{k+1,T_{k+1}}$ 可测. 结合 (2.5) 和 (2.6) 可知, X_{k+1} 对 $\sigma(X_k, V_{k+1}, I_{2,k})$ 可测, 而由前面的论述易知,

$$\sigma(X_k, V_{k+1}, I_{2,k}) \subseteq \mathcal{M}_{k+1,T_{k+1}},$$

所以 X_{k+1} 对 $\mathcal{M}_{k+1,T_{k+1}}$ 可测. 此时可总结得到 $Z_{k+1} = (X_{k+1}, V_{k+1})$ 对 $\mathcal{M}_{k+1,T_{k+1}}$ 可测. 故由数学归纳法, 结论成立. 证明完毕. $\square$

引理 3 对任意 $t \geq t_0$ 和 $s \geq 0$, $Z(t)$ 对 $\mathcal{M}_{\infty,t}$ 可测且 $W(t+s) - W(t)$ 与 $\mathfrak{F}_t^Z$ 独立.

证明 由于

$$\begin{aligned} X(t) \chi_{\{t \in [T_k, T_{k+1})\}} &= X_k \chi_{\{T_k \leq t\}} \chi_{\{T_{k+1} > t\}}, \\ V(t) \chi_{\{t \in [T_k, T_{k+1})\}} &= \Phi_{X_k}(t; V_k, T_k) \chi_{\{T_k \leq t\}} \chi_{\{T_{k+1} > t\}}, \end{aligned}$$

故利用引理 2 可以看到, $X(t) \chi_{\{t \in [T_k, T_{k+1})\}}$ 和 $V(t) \chi_{\{t \in [T_k, T_{k+1})\}}$ 均对 $\mathcal{M}_{\infty,t}$ 可测. 故 $Z(t) \chi_{\{t \in [T_k, T_{k+1})\}}$ 也对 $\mathcal{M}_{\infty,t}$ 可测, 这也就意味着 $Z(t)$ 对 $\mathcal{M}_{\infty,t}$ 可测, 进而有 $\mathfrak{F}_t^Z \subseteq \mathcal{M}_{\infty,t}$. 此时利用 Wiener 过程的独立增量性可知, 对任意 $s \geq 0$, $W(t+s) - W(t)$ 与 $\mathcal{M}_{\infty,t}$ 独立, 从而, $W(t+s) - W(t)$ 与 $\mathfrak{F}_t^Z$ 独立. 证明完毕. $\square$

引理 4 剩余寿命 $\gamma(t)$ 在 $\widehat{\mathfrak{F}}_t$ 下的条件分布满足

$$\mathbb{P}(\gamma(t) > s, T_k \leq t < T_{k+1} \mid \widehat{\mathfrak{F}}_t) = \exp \left(- \int_t^{t+s} \lambda(X(t), \Phi_{X(t)}(h; V(t), t)) dh \right) \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}. \quad (2.9)$$

证明 令 E 为 $\mathbb{R}^{p+d}$ 上的 Borel 集, 则对任意 $t_0 \leq h \leq t$, 有

$$\{Z_h \in E\} \cap \{T_k \leq t < T_{k+1}\}$$

$$= \left[\left(\bigcup_{l=0}^{k-1} \{(X_l, \Phi_{X_l}(h; V_l, T_l)) \in E\} \cap \{T_l \leq h < T_{l+1}\} \right) \cup \{(X_k, \Phi_{X_k}(h; V_k, T_k)) \in E\} \cap \{T_k \leq h\} \right] \\ \cap \{T_k \leq t < T_{k+1}\}$$

由于 X_l 对 $\mathcal{M}_{l, T_l}$ 可测, $\Phi_{X_l}(h; V_l, T_l)\chi_{\{T_l \leq h\}}$ 对 $\sigma(\mathcal{M}_{l, T_l}, \{W(h); h \leq h\})$ 可测, 故

$$\{(X_l, \Phi_{X_l}(h; V_l, T_l)) \in E\} \cap \{T_l \leq h\} \in \mathcal{M}_{l, h},$$

进而,

$$\bigcup_{l=0}^{k-1} (\{(X_l, \Phi_{X_l}(h; V_l, T_l)) \in E\} \cap \{T_l \leq h < T_{l+1}\}) \cup (\{(X_k, \Phi_{X_k}(h; V_k, T_k)) \in E\} \cap \{T_k \leq h\}) \in \mathcal{M}_{k, t}.$$

所以, 可总结得到, 对任意 $A \in \mathfrak{F}_t$, 存在 $A_k \in \mathcal{M}_{k, t}$ 使得

$$A \cap \{T_k \leq t < T_{k+1}\} = A_k \cap \{T_k \leq t < T_{k+1}\}.$$

进而, 若还有 $A \in \widehat{\mathfrak{F}}_t$, 则存在 $A_k \in \mathcal{M}_{k, +\infty}$ 使得

$$A \cap \{T_k \leq t < T_{k+1}\} = A_k \cap \{T_k \leq t < T_{k+1}\}.$$

这样, 对上述 $A \in \widehat{\mathfrak{F}}_t$, 有

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(\{\gamma(t) > s, T_k \leq t < T_{k+1}\} \cap A) \\ &= \mathbb{P}(\{S_{k+1} > t + s - T_k, T_k \leq t\} \cap A_k) \\ &= \mathbb{P}\left(\left\{\int_0^{t+s-T_k} \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(T_k + h; V_k, T_k))dh < -\ln I_{1, k+1}, T_k \leq t\right\} \cap A_k\right) \\ &= \mathbb{E}\left[\mathbb{P}\left(\int_0^{t+s-T_k} \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(T_k + h; V_k, T_k))dh < -\ln I_{1, k+1} \mid \mathcal{M}_{k, +\infty}\right) \chi_{\{T_k \leq t\}} \chi_{A_k}\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\exp\left(-\int_0^{t+s-T_k} \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(T_k + h; V_k, T_k))dh\right) \chi_{\{T_k \leq t\}} \chi_{A_k}\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\exp\left(-\int_{t-T_k}^{t+s-T_k} \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(T_k + h; V_k, T_k))dh\right) \chi_{\{T_k \leq t\}}\right. \\ &\quad \left. \times \exp\left(-\int_0^{t-T_k} \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(T_k + h; V_k, T_k))dh\right) \chi_{\{T_k \leq t\}} \chi_{A_k}\right]. \end{aligned} \quad (2.10)$$

注意到,

$$\begin{aligned} & \exp\left(-\int_0^{t-T_k} \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(T_k + h; V_k, T_k))dh\right) \chi_{\{T_k \leq t\}} \\ &= \exp\left(-\int_{T_k}^t \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(h; V_k, T_k))dh\right) \chi_{\{T_k \leq t\}} \\ &= \mathbb{P}\left(\int_{T_k}^t \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(h; V_k, T_k))dh > -\ln I_{1, k+1}, T_k \leq t \mid \mathcal{M}_{k, +\infty}\right) \\ &= \mathbb{P}(T_k \leq t < T_{k+1} \mid \mathcal{M}_{k, +\infty}), \end{aligned} \quad (2.11)$$

以及

$$\begin{aligned} & \exp\left(-\int_{t-T_k}^{t+s-T_k} \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(T_k+h; V_k, T_k))dh\right) \chi_{\{T_k \leq t\}} \\ &= \exp\left(-\int_t^{t+s} \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(h; V_k, T_k))dh\right) \chi_{\{T_k \leq t\}}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

这样结合 (2.10)–(2.12) 得到

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(\{\gamma(t) > s, T_k \leq t < T_{k+1}\} \cap A) \\ &= \mathbb{E}\left[\exp\left(-\int_t^{t+s} \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(h; V_k, T_k))dh\right) \chi_{\{T_k \leq t\}} \mathbb{P}(T_k \leq t < T_{k+1} \mid \mathcal{M}_{k,+\infty}) \chi_{A_k}\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\mathbb{E}\left[\exp\left(-\int_t^{t+s} \lambda(X_k, \Phi_{X_k}(h; V_k, T_k))dh\right) \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \chi_{A_k} \mid \mathcal{M}_{k,+\infty}\right]\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\exp\left(-\int_t^{t+s} \lambda(X(t), \Phi_{X(t)}(h; V(t), t))dh\right) \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \chi_A\right]. \end{aligned}$$

因此可以总结得到 (2.9). 证明完毕. $\square$

定理 2 剩余寿命 $\gamma(t)$ 和下次反应序号 $\eta(t)$ 在 $\widehat{\mathfrak{F}}_t$ 条件下的联合分布满足

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(\eta(t) = j, \gamma(t) > s, T_k \leq t < T_{k+1} \mid \widehat{\mathfrak{F}}_t) \\ &= \int_s^{+\infty} \lambda_j(X(t), \Phi_{X(t)}(t+s; V(t), t)) \\ & \quad \times \exp\left(-\int_0^s \lambda(X(t), \Phi_{X(t)}(t+h; V(t), t))dh\right) d\hat{s} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

其中 $t \in [t_0, +\infty)$, $j \in \{1, \dots, q\}$, $s \in [0, +\infty)$, $k \in \mathbb{N}$.

证明 在引理 4 已经看到, 对任意 $A \in \widehat{\mathfrak{F}}_t$, 存在 $A_k \in \mathcal{M}_{k,+\infty}$ 使得

$$A \cap \{T_k \leq t < T_{k+1}\} = A_k \cap \{T_k \leq t < T_{k+1}\}.$$

那么,

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(\{\eta(t) = j, \gamma(t) > s, T_k \leq t < T_{k+1}\} \cap A) \\ &= \mathbb{P}(\{J_{k+1} = j, T_k \leq t, T_{k+1} > t+s\} \cap A_k) \\ &= \mathbb{P}\left(\left\{\sum_{l=1}^{j-1} \frac{\lambda_l(X_k, V_{k+1})}{\lambda(X_k, V_{k+1})} < I_{2,k+1} \leq \sum_{l=1}^j \frac{\lambda_l(X_k, V_{k+1})}{\lambda(X_k, V_{k+1})}, T_k \leq t, T_{k+1} > t+s\right\} \cap A_k\right) \\ &= \mathbb{E}\left[\mathbb{P}\left(\sum_{l=1}^{j-1} \frac{\lambda_l(X_k, V_{k+1})}{\lambda(X_k, V_{k+1})} < I_{2,k+1} \leq \sum_{l=1}^j \frac{\lambda_l(X_k, V_{k+1})}{\lambda(X_k, V_{k+1})} \mid \mathcal{N}_{k+1,+\infty}\right) \chi_{\{T_k \leq t\}} \chi_{\{T_{k+1} > t+s\}} \chi_{A_k}\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\frac{\lambda_j(X_k, V_{k+1})}{\lambda(X_k, V_{k+1})} \chi_{\{T_k \leq t\}} \chi_{\{T_{k+1} > t+s\}} \chi_{A_k}\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\frac{\lambda_j(X(t), \Phi_{X(t)}(t+\gamma(t); V(t), t))}{\lambda(X(t), \Phi_{X(t)}(t+\gamma(t); V(t), t))} \chi_{(s,+\infty)}(\gamma(t)) \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \chi_A\right]. \end{aligned}$$

故

$$\mathbb{P}(\eta(t) = j, \gamma(t) > s, T_k \leq t < T_{k+1} \mid \widehat{\mathfrak{F}}_t)$$

$$\begin{aligned}
&= \mathbb{E} \left[\frac{\lambda_j(X(t), \Phi_{X(t)}(t + \gamma(t); V(t), t))}{\lambda(X(t), \Phi_{X(t)}(t + \gamma(t); V(t), t))} \chi_{(s, +\infty)}(\gamma(t)) \mid \widehat{\mathfrak{F}}_t \right] \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \\
&= \int_0^{+\infty} \frac{\lambda_j(X(t), \Phi_{X(t)}(t + \hat{s}; V(t), t))}{\lambda(X(t), \Phi_{X(t)}(t + \hat{s}; V(t), t))} \chi_{(s, +\infty)}(\hat{s}) \mathbb{P}(\gamma(t) \in d\hat{s} \mid \widehat{\mathfrak{F}}_t) \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \\
&= \int_s^{+\infty} \frac{\lambda_j(X(t), \Phi_{X(t)}(t + \hat{s}; V(t), t))}{\lambda(X(t), \Phi_{X(t)}(t + \hat{s}; V(t), t))} \mathbb{P}(\gamma(t) \in d\hat{s}, T_k \leq t < T_{k+1} \mid \widehat{\mathfrak{F}}_t) \\
&= \int_s^{+\infty} \frac{\lambda_j(X(t), \Phi_{X(t)}(t + \hat{s}; V(t), t))}{\lambda(X(t), \Phi_{X(t)}(t + \hat{s}; V(t), t))} \lambda(X(t), \Phi_{X(t)}(t + \hat{s}; V(t), t)) \\
&\quad \times \exp \left(- \int_0^{\hat{s}} \lambda(X(t), \Phi_{X(t)}(t + h; V(t), t)) dh \right) d\hat{s} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \\
&= \int_s^{+\infty} \lambda_j(X(t), \Phi_{X(t)}(t + \hat{s}; V(t), t)) \exp \left(- \int_0^{\hat{s}} \lambda(X(t), \Phi_{X(t)}(t + h; V(t), t)) dh \right) d\hat{s} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}.
\end{aligned}$$

即证 (2.13). $\square$

2.3 过程的 Markov 性

下面令 $\phi \in \mathcal{B}(\mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d)$, 其中 $\mathcal{B}(E)$ 表示 E 上的有界可测函数族. 定义函数 ψ 如下:

$$\psi(\hat{t}; x, v, t) = \mathbb{E} \left[\phi(x, \Phi_x(\hat{t}; v, t)) \exp \left(- \int_0^{\hat{t}-t} \lambda(x, \Phi_x(t+h; v, t)) dh \right) \right], \quad (2.14)$$

则 $\psi \in \mathcal{B}(\mathbb{R} \times \mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R})$. 进而, 定义算子 $\mathcal{T} : \mathcal{B}(\mathbb{R} \times \mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{B}(\mathbb{R} \times \mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R})$ 如下:

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}\varphi(\hat{t}; x, v, t) &= \mathbb{E} \left[\int_0^{\hat{t}-t} \sum_{j=1}^q \varphi(\hat{t}; x + \nu_j, \Phi_x(t + \hat{s}; v, t), t + \hat{s}) \right. \\
&\quad \left. \times \lambda_j(x, \Phi_x(t + \hat{s}; v, t)) \exp \left(- \int_0^{\hat{s}} \lambda(x, \Phi_x(t+h; v, t)) dh \right) d\hat{s} \right], \quad (2.15)
\end{aligned}$$

其中 $\varphi \in \mathcal{B}(\mathbb{R} \times \mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R})$.

引理 5 对任意 $l, k \in \mathbb{N}$ 且 $l < k$, 有

$$\mathbb{E}[\psi(t; X_k, V_k, T_k) \chi_{\{T_k \leq t\}} \mid \mathcal{M}_{l, T_l}] = \mathcal{T}^{k-l} \psi(t; X_l, V_l, T_l) \chi_{\{T_l \leq t\}}.$$

证明 利用定理 2 和文献 [35] 的附录 1 中的命题 0.6, 可得

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}[\psi(t; X_k, V_k, T_k) \chi_{\{T_k \leq t\}} \mid \mathcal{M}_{k-1, T_{k-1}}] \\
&= \mathbb{E}[\mathbb{E}[\psi(t; X_{k-1} + \nu_{J_k}, \Phi_{X_{k-1}}(T_{k-1} + S_k; V_{k-1}, T_{k-1}), T_{k-1} + S_k) \\
&\quad \times \chi_{\{S_k \leq t - T_{k-1}\}} \chi_{\{T_{k-1} \leq t\}} \mid \mathcal{M}_{k-1, \infty}] \mid \mathcal{M}_{k-1, T_{k-1}}] \\
&= \mathbb{E} \left[\int_0^{t-T_{k-1}} \sum_{j=1}^q \psi(t; X_{k-1} + \nu_j, \Phi_{X_{k-1}}(T_{k-1} + \hat{s}; V_{k-1}, T_{k-1}), T_{k-1} + \hat{s}) \right. \\
&\quad \left. \times \mathbb{P}(S_k \in d\hat{s}, J_k = j, T_{k-1} \leq t \mid \mathcal{M}_{k-1, \infty}) \mid \mathcal{M}_{k-1, T_{k-1}} \right] \\
&= \mathbb{E} \left[\int_0^{t-T_{k-1}} \sum_{j=1}^q \psi(t; X_{k-1} + \nu_j, \Phi_{X_{k-1}}(T_{k-1} + \hat{s}; V_{k-1}, T_{k-1}), T_{k-1} + \hat{s}) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \lambda_j(X_{k-1}, \Phi_{X_{k-1}}(T_{k-1} + \hat{s}; V_{k-1}, T_{k-1})) \\
 & \times \exp\left(-\int_0^{\hat{s}} \lambda(X_{k-1}, \Phi_{X_{k-1}}(T_{k-1} + h; V_{k-1}, T_{k-1}))dh\right) d\hat{s} \Big| \mathcal{M}_{k-1, T_{k-1}} \Big] \chi_{\{T_{k-1} \leq t\}} \\
 & = \mathbb{E} \left[\int_0^{t-\hat{t}} \sum_{j=1}^q \psi(t; \hat{x} + \nu_j, \Phi_{\hat{x}}(\hat{t} + \hat{s}; \hat{v}, \hat{t}), \hat{t} + \hat{s}) \lambda_j(\hat{x}, \Phi_{\hat{x}}(\hat{t} + \hat{s}; \hat{v}, \hat{t})) \right. \\
 & \quad \times \exp\left(-\int_0^{\hat{s}} \lambda(\hat{x}, \Phi_{\hat{x}}(\hat{t} + h; \hat{v}, \hat{t}))dh\right) d\hat{s} \Big] \Big|_{(\hat{x}, \hat{v}, \hat{t})=(X_{k-1}, V_{k-1}, T_{k-1})} \chi_{\{T_{k-1} \leq t\}} \\
 & = \mathcal{T}\psi(t; X_{k-1}, V_{k-1}, T_{k-1}) \chi_{\{T_{k-1} \leq t\}}.
 \end{aligned}$$

由于 $\mathcal{M}_{k, T_k}$ 关于 k 单调递增, 那么利用归纳法可得

$$\begin{aligned}
 & \mathbb{E}[\psi(t; X_k, V_k, T_k) \chi_{\{T_k \leq t\}} \mid \mathcal{M}_{l, T_l}] \\
 & = \mathbb{E}[\cdots \mathbb{E}[\psi(t; X_k, V_k, T_k) \chi_{\{T_k \leq t\}} \mid \mathcal{M}_{k-1, T_{k-1}}] \mid \mathcal{M}_{k-2, T_{k-2}}] \mid \cdots \mid \mathcal{M}_{k-(k-l), T_{k-(k-l)}}] \\
 & = \mathcal{T}^{k-l} \psi(t; X_{k-1}, V_{k-1}, T_{k-1}) \chi_{\{T_{k-(k-l)} \leq t\}}.
 \end{aligned}$$

证明完毕. □

定理 3 对上述 $\phi \in \mathcal{B}(\mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d)$ 及 $t \geq t_0, s \geq 0$, 有

$$\mathbb{E}[\phi(X(t+s), V(t+s)) \mid \mathfrak{F}_t] = \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{T}^l \psi(t+s; X(t), V(t), t).$$

证明 首先, 考查 $\mathbb{E}[\phi(Z(t+s)) \chi_{\{\gamma(t) > s\}} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \mid \mathfrak{F}_t]$. 利用引理 4 可得

$$\begin{aligned}
 & \mathbb{E}[\phi(Z(t+s)) \chi_{\{\gamma(t) > s\}} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \mid \widehat{\mathfrak{F}}_t] \\
 & = \mathbb{E}[\phi(X(t), \Phi_{X(t)}(t+s; V(t), t)) \chi_{\{\gamma(t) > s\}} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \mid \widehat{\mathfrak{F}}_t] \\
 & = \mathbb{E}[\chi_{\{\gamma(t) > s\}} \mid \widehat{\mathfrak{F}}_t] \phi(X(t), \Phi_{X(t)}(t+s; V(t), t)) \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \\
 & = \phi(X(t), \Phi_{X(t)}(t+s; V(t), t)) \exp\left(-\int_0^s \lambda(X(t), \Phi_{X(t)}(t+h; V(t), t))dh\right) \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}.
 \end{aligned}$$

这样, 由于 $\mathfrak{F}_t \subseteq \widehat{\mathfrak{F}}_t$, 并利用文献 [35] 的附录 1 中的命题 0.6, 有

$$\begin{aligned}
 & \mathbb{E}[\phi(Z(t+s)) \chi_{\{\gamma(t) > s\}} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \mid \mathfrak{F}_t] \\
 & = \mathbb{E}[\mathbb{E}[\phi(Z(t+s)) \chi_{\{\gamma(t) > s\}} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \mid \widehat{\mathfrak{F}}_t] \mid \mathfrak{F}_t] \\
 & = \mathbb{E}\left[\phi(X(t), \Phi_{X(t)}(t+s; V(t), t)) \exp\left(-\int_0^s \lambda(X(t), \Phi_{X(t)}(t+h; V(t), t))dh\right) \Big| \mathfrak{F}_t\right] \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \\
 & = \mathbb{E}\left[\phi(x, \Phi_x(t+s; v, t)) \exp\left(-\int_0^s \lambda(x, \Phi_x(t+h; v, t))dh\right) \Big| \mathfrak{F}_t\right] \Big|_{(x,v)=(X(t), V(t))} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \\
 & = \mathbb{E}\left[\phi(x, \Phi_x(t+s; v, t)) \exp\left(-\int_0^{(t+s)-t} \lambda(x, \Phi_x(t+h; v, t))dh\right) \Big| \Big|_{(x,v)=(X(t), V(t))} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}\right] \\
 & = \psi(t+s; X(t), V(t), t) \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}. \tag{2.16}
 \end{aligned}$$

接下来, 考查

$$\mathbb{E}[\phi(X(t+s), V(t+s)) \chi_{\{T_{k+l} \leq t+s < T_{k+l+1}\}} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \mid \mathfrak{F}_t],$$

其中 $k \in \mathbb{N}$, $l \in \mathbb{N}_+$. 注意到, 对于任意 $t \geq t_0$ 和 $h \in [t_0, t]$ 及 $\mathbb{R}^{p+d}$ 上的 Borel 集 E , 有

$$\begin{aligned} & \{Z_h \in E\} \cap \{T_k \leq t < T_{k+1}\} \\ &= \left(\bigcup_{l=0}^k \{(X_l, \Phi_{X_l}(h \wedge T_{l+1}; V_l, T_l)) \in E\} \cap \{T_l \leq h < T_{l+1}\} \right) \cap \{T_k \leq t < T_{k+1}\}. \end{aligned}$$

这意味着 $\{Z_h \in E\} \cap \{T_k \leq t < T_{k+1}\} \in \mathcal{M}_{k+1, T_{k+1}}$. 进而可得, 对任意 $A \in \mathfrak{F}_t$, 有 $A \cap \{T_k \leq t < T_{k+1}\} \in \mathcal{M}_{k+1, T_{k+1}}$. 那么, 利用引理 4 及文献 [35] 的附录 1 中的命题 0.6, 有

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}[\phi(X(t+s), V(t+s))\chi_{\{T_{k+l} \leq t+s < T_{k+l+1}\}}\chi_A\chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}] \\ &= \mathbb{E}[\phi(X_{k+l}, \Phi_{X_{k+l}}(t+s; V_{k+l}, T_{k+l}))\chi_{\{T_{k+l} \leq t+s < T_{k+l+1}\}}\chi_A\chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}] \\ &= \mathbb{E}[\phi(X_{k+l}, \Phi_{X_{k+l}}(t+s; V_{k+l}, T_{k+l}))\chi_{\{S_{k+l+1} > t+s-T_{k+l}\}}\chi_{\{T_{k+l} \leq t+s\}}\chi_A\chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}] \\ &= \mathbb{E}[\mathbb{P}(S_{k+l+1} > t+s-T_{k+l} \mid \mathcal{M}_{k+l, \infty})\phi(X_{k+l}, \Phi_{X_{k+l}}(t+s; V_{k+l}, T_{k+l}))\chi_{\{T_{k+l} \leq t+s\}}\chi_A\chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}] \\ &= \mathbb{E}\left[\exp\left(-\int_{T_{k+l}}^{t+s} \lambda(X_{k+l}, \Phi_{X_{k+l}}(h; V_{k+l}, T_{k+l}))dh\right)\right. \\ &\quad \left.\times \phi(X_{k+l}, \Phi_{X_{k+l}}(t+s; V_{k+l}, T_{k+l}))\chi_{\{T_{k+l} \leq t+s\}}\chi_A\chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\mathbb{E}\left[\exp\left(-\int_{T_{k+l}}^{t+s} \lambda(X_{k+l}, \Phi_{X_{k+l}}(h; V_{k+l}, T_{k+l}))dh\right)\phi(X_{k+l}, \Phi_{X_{k+l}}(t+s; V_{k+l}, T_{k+l})) \mid \mathcal{M}_{k+l, T_{k+l}}\right]\right. \\ &\quad \left.\times \chi_{\{T_{k+l} \leq t+s\}}\chi_A\chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\mathbb{E}\left[\exp\left(-\int_{\hat{t}}^{t+s} \lambda(\hat{x}, \Phi_{\hat{x}}(h; \hat{v}, \hat{t}))dh\right)\phi(\hat{x}, \Phi_{\hat{x}}(t+s; \hat{v}, \hat{t}))\right] \mid_{(\hat{x}, \hat{v}, \hat{t})=(X_{k+l}, V_{k+l}, T_{k+l})}\right. \\ &\quad \left.\times \chi_{\{T_{k+l} \leq t+s\}}\chi_A\chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}\right] \\ &= \mathbb{E}[\psi(t+s; X_{k+l}, V_{k+l}, T_{k+l})\chi_{\{T_{k+l} \leq t+s\}}\chi_A\chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}]. \end{aligned}$$

进而, 由引理 5 可知,

$$\mathbb{E}[\psi(t+s; X_{k+l}, V_{k+l}, T_{k+l})\chi_{\{T_{k+l} \leq t+s\}} \mid \mathcal{M}_{k+1, T_{k+1}}] = \mathcal{T}^{l-1}\psi(t+s; X_{k+1}, V_{k+1}, T_{k+1})\chi_{\{T_{k+1} \leq t+s\}}.$$

从而,

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}[\phi(X(t+s), V(t+s))\chi_{\{T_{k+l} \leq t+s < T_{k+l+1}\}}\chi_A\chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}] \\ &= \mathbb{E}[\mathbb{E}[\psi(t+s; X_{k+l}, V_{k+l}, T_{k+l})\chi_{\{T_{k+l} \leq t+s\}} \mid \mathcal{M}_{k+1, T_{k+1}}]\chi_A\chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}] \\ &= \mathbb{E}[\mathcal{T}^{l-1}\psi(t+s; X_{k+1}, V_{k+1}, T_{k+1})\chi_{\{T_{k+1} \leq t+s\}}\chi_A\chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}]. \end{aligned}$$

这样, 结合定理 2 就有

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}[\phi(X(t+s), V(t+s))\chi_{\{T_{k+l} \leq t+s < T_{k+l+1}\}}\chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \mid \mathfrak{F}_t] \\ &= \mathbb{E}[\mathcal{T}^{l-1}\psi(t+s; X_{k+1}, V_{k+1}, T_{k+1})\chi_{\{T_{k+1} \leq t+s\}} \mid \mathfrak{F}_t]\chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \\ &= \mathbb{E}[\mathcal{T}^{l-1}\psi(t+s; X(t) + \nu_{\eta(t)}, \Phi_{X(t)}(t + \gamma(t); V(t), t) + \gamma(t))\chi_{\{\gamma(t) \leq s\}} \mid \mathfrak{F}_t]\chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \mathbb{E}[\mathbb{E}[\mathcal{T}^{l-1}\psi(t+s; X(t) + \nu_{\eta(t)}, \Phi_{X(t)}(t + \gamma(t); V(t), t), t + \gamma(t)) \chi_{\{\gamma(t) \leq s\}} \mid \widehat{\mathfrak{F}}_t] \mid \mathfrak{F}_t] \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \\
 &= \mathbb{E} \left[\int_0^s \sum_{j=1}^q \mathcal{T}^{l-1}\psi(t+s; X(t) + \nu_j, \Phi_{X(t)}(t + \hat{s}; V(t), t), t + \hat{s}) \right. \\
 &\quad \times \mathbb{P}[\gamma(t) \in d\hat{s}, \eta(t) = j \mid \widehat{\mathfrak{F}}_t] \mid \mathfrak{F}_t \Big] \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \\
 &= \mathbb{E} \left[\int_0^s \sum_{j=1}^q \mathcal{T}^{l-1}\psi(t+s; X(t) + \nu_j, \Phi_{X(t)}(t + \hat{s}; V(t), t), t + \hat{s}) \lambda_j(X(t), \Phi_{X(t)}(t + \hat{s}; V(t), t)) \right. \\
 &\quad \times \exp \left(- \int_0^s \lambda(X(t), \Phi_{X(t)}(t + h; V(t), t)) dh \right) d\hat{s} \mid \mathfrak{F}_t \Big] \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \\
 &= \mathbb{E} \left[\int_0^{(t+s)-t} \sum_{j=1}^q \mathcal{T}^{l-1}\psi(t+s; \hat{x} + \nu_j, \Phi_{\hat{x}}(t + \hat{s}; \hat{v}, t), t + \hat{s}) \lambda_j(\hat{x}, \Phi_{\hat{x}}(t + \hat{s}; \hat{v}, t)) \right. \\
 &\quad \times \exp \left(- \int_0^s \lambda(\hat{x}, \Phi_{\hat{x}}(t + h; \hat{v}, t)) dh \right) d\hat{s} \Big] \Big|_{(\hat{x}, \hat{v}) = (X(t), V(t))} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \\
 &= \mathcal{T}^l \psi(t+s; X(t), V(t), t) \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}. \tag{2.17}
 \end{aligned}$$

因此, 结合 (2.16) 和 (2.17), 可以总结得到

$$\begin{aligned}
 &\mathbb{E}[\phi(X(t+s), V(t+s)) \mid \mathfrak{F}_t] \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \\
 &= \sum_{l=0}^{\infty} \mathbb{E}[\phi(X(t+s), V(t+s)) \chi_{\{T_{k+l} \leq t+s < T_{k+l+1}\}} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \mid \mathfrak{F}_t] \\
 &= \mathbb{E}[\phi(X(t+s), V(t+s)) \chi_{\{\gamma(t) > s\}} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \mid \mathfrak{F}_t] \\
 &\quad + \sum_{l=1}^{\infty} \mathbb{E}[\phi(X(t+s), V(t+s)) \chi_{\{T_{k+l} \leq t+s < T_{k+l+1}\}} \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \mid \mathfrak{F}_t] \\
 &= \psi(t+s; X(t), V(t), t) \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} + \sum_{l=1}^{\infty} \mathcal{T}^l \psi(t+s; X(t), V(t), t) \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}} \\
 &= \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{T}^l \psi(t+s; X(t), V(t), t) \chi_{\{T_k \leq t < T_{k+1}\}}.
 \end{aligned}$$

证明完毕. □

由定理 3 的结果可得 $\mathbb{E}[\phi(Z(t+s)) \mid \mathfrak{F}_t]$ 是 $Z(t)$ -可测的, 于是有如下定理.

定理 4 $Z(t)$ 是一个时齐的 $\mathfrak{F}_t$ -Markov 过程.

证明 首先, $Z(t)$ 具有 $\mathfrak{F}_t$ -Markov 性, 这是因为由定理 3 可知,

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}[\phi(Z(t+s)) \mid Z(t)] &= \mathbb{E}[\mathbb{E}[\phi(Z(t+s)) \mid \mathfrak{F}_t] \mid Z(t)] \\
 &= \mathbb{E} \left[\sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{T}^l \psi(t+s; X(t), V(t), t) \mid Z(t) \right] \\
 &= \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{T}^l \psi(t+s; X(t), V(t), t) \\
 &= \mathbb{E}[\phi(Z(t+s)) \mid \mathfrak{F}_t].
 \end{aligned}$$

下面证明时齐性. 由于 $\Phi_x(t+s; v, t)$ ($t \in [t_0, +\infty)$, $s \in [0, \infty)$) 是自治系统 (2.4) 的强解, 其为一个时齐 Markov 过程, 即 $\Phi_x(t+s; v, t)$ 与 $\Phi_x(s; v, 0)$ 具有 $\mathbb{P}$ 意义下相同的有限维分布. 故在定理 3 的证明过程中, 不难看到:

- (i) $\psi(t+s; x, v, t) = \psi(s; x, v, 0)$;
- (ii) 对任意 $l \in \mathbb{N}_+$, 若 $\mathcal{T}^{l-1}\psi(t+s; x, v, t) = \mathcal{T}^{l-1}\psi(s; x, v, 0)$, 则由 (2.15) 得到

$$\mathcal{T}^l\psi(t+s; x, v, t) = \mathcal{T}^l\psi(s; x, v, 0).$$

从而, 由数学归纳法便有 $\mathcal{T}^l\psi(t+s; x, v, t) = \mathcal{T}^l\psi(s; x, v, 0)$. 因此,

$$\mathbb{E}[\phi(Z(t+s)) | Z(t)] = \mathbb{E}[\phi(Z(t+s)) | \mathfrak{F}_t] = \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{T}^l\psi(t+s; X(t), V(t), t) = \sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{T}^l\psi(s; X(t), V(t), 0)$$

只依赖于 $Z(t)$ 和 s . 证明完毕. $\square$

还能看到, $Z(t)$ 的跳跃行为也满足随机化学反应网络的要求.

推论 1 对任意 $t \in [t_0, +\infty)$ 及 $z = (x, v) \in \mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d$, 有

$$\begin{aligned} \lim_{s \rightarrow 0^+} s^{-1} \mathbb{P}(N_j(t+s) - N_j(t) = 1 | (X(t), V(t)) = (x, v)) &= \lambda_j(x, v), \\ \lim_{s \rightarrow 0^+} s^{-1} \mathbb{P}(N(t+s) - N(t) \geq 2 | (X(t), V(t)) = (x, v)) &= 0, \end{aligned}$$

其中 $N_j(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \chi_{\{t \geq T_k, J_k=j\}}$ 表示 $[t_0, t]$ 上反应 R_j 的发生次数.

证明 记

$$\mathbb{P}_{x,v}(\cdot) = \mathbb{P}(\cdot | (X(0), V(0)) = (x, v)), \quad \mathbb{E}_{x,v}(\cdot) = \mathbb{E}[\cdot | (X(0), V(0)) = (x, v)].$$

由于 $Z(t)$ 是时齐 Markov 过程, 故只需证明

$$\lim_{s \rightarrow 0^+} s^{-1} \mathbb{P}_{x,v}(N_j(s) = 1) = \lambda_j(x, v), \quad (2.18)$$

$$\lim_{s \rightarrow 0^+} s^{-1} \mathbb{P}_{x,v}(N(s) \geq 2) = 0. \quad (2.19)$$

由引理 4 可知,

$$\mathbb{P}_{x,v}(N(s) = 0) = \mathbb{P}_{x,v}(\gamma(0) > s) = \mathbb{E} \left[\exp \left(- \int_0^s \lambda(x, \Phi(x, \Phi_x(h; v, 0))) dh \right) \right].$$

进而,

$$\lim_{s \rightarrow 0^+} s^{-1} \mathbb{P}_{x,v}(N(s) \geq 1) = \lambda(x, v). \quad (2.20)$$

这样,

$$\begin{aligned} &\mathbb{P}_{x,v}(N(s) = 1, N_j(s) = 1) \\ &= \mathbb{P}_{x,v}(J_1 = j, S_1 \leq s, S_2 > s - S_1) \\ &= \mathbb{E}_{x,v}[\mathbb{P}_{x,v}(S_2 > s - S_1 | \mathcal{M}_{1,+\infty}) \chi_{\{J_1=j, S_1 \leq s\}}] \\ &= \mathbb{E}_{x,v} \left[\exp \left(- \int_0^{s-S_1} \lambda(X_1, \Phi_{X_1}(T_1+h; V_1, T_1)) dh \right) \chi_{\{J_1=j, S_1 \leq s\}} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \mathbb{E}_{x,v} \left[\exp \left(- \int_0^{s-S_1} \lambda(x + \nu_j, \Phi_{x+\nu_j}(S_1 + h; \Phi_x(S_1; v, 0), S_1)) dh \right) \chi_{\{J_1=j, S_1 \leq s\}} \right] \\
 &= \mathbb{E}_{x,v} \left[\mathbb{E}_{x,v} \left[\exp \left(- \int_0^{s-\gamma(0)} \lambda(x + \nu_j, \Phi_{x+\nu_j}(\gamma(0) + h; \Phi_x(\gamma(0); v, 0), \gamma(0))) dh \right) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \times \chi_{\{\eta(0)=j, \gamma(0) \leq s\}} \mid \widehat{\mathfrak{F}}_0 \right] \right] \\
 &= \mathbb{E}_{x,v} \left[\int_0^s \exp \left(- \int_0^{s-\gamma(0)} \lambda(x + \nu_j, \Phi_{x+\nu_j}(\gamma(0) + h; \Phi_x(\gamma(0); v, 0), \gamma(0))) dh \right) \right. \\
 &\quad \left. \times \mathbb{P}[\gamma(0) \in d\hat{s}, \eta(0) = j \mid \widehat{\mathfrak{F}}_0] \right] \\
 &= \mathbb{E}_{x,v} \left[\int_0^s \exp \left(- \int_0^{s-\hat{s}} \lambda(x + \nu_j, \Phi_{x+\nu_j}(\hat{s} + h; \Phi_x(\hat{s}; v, 0), \hat{s})) dh \right) \lambda_j(x, \Phi_x(\hat{s}; v, 0)) \right. \\
 &\quad \left. \times \exp \left(- \int_0^{\hat{s}} \lambda(x, \Phi_x(h; v, 0)) dh \right) d\hat{s} \right],
 \end{aligned}$$

并将上式的最终结果记作 $\mathbb{E}_{x,v}[\int_0^s F_j(s, \hat{s}) d\hat{s}]$. 由于 $\Phi_x(t; v, 0)$ 关于 t 连续, 而 $\lambda(x, v)$ 关于 v 连续, 那么可应用 L'Hôspital 法则得到

$$\begin{aligned}
 &\lim_{s \rightarrow 0^+} s^{-1} \mathbb{P}_{x,v}(N(s) = 1, N_j(s) = 1) \\
 &= \lim_{s \rightarrow 0^+} \mathbb{E}_{x,v} \left[F_j(s, s) + \int_0^s \frac{\partial}{\partial s} F_j(s, \hat{s}) d\hat{s} \right] \\
 &= \lim_{s \rightarrow 0^+} \mathbb{E} \left[\lambda_j(x, \Phi_x(s; v, 0)) \exp \left(- \int_0^s \lambda(x, \Phi_x(h; v, 0)) dh \right) \right] \\
 &= \lambda_j(x, v).
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

对 (2.21) 关于 j 求和便得到

$$\lim_{s \rightarrow 0^+} s^{-1} \mathbb{P}_{x,v}(N(s) = 1) = \lambda(x, v). \tag{2.22}$$

结合 (2.20) 和 (2.22) 便证明了 (2.19). 结合 (2.19) 和 (2.21) 也可看到 (2.18) 成立. 证明完毕. $\square$

2.4 过程的无穷小生成元与鞅问题

由于 $Z(t, \omega)$ 是时齐 Markov 过程, 故下面只考虑初始时刻 $t_0 = 0$ 的情形. 此时, $Z(t)$ 导出了 $\mathcal{B}(\mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d)$ 上的一个算子半群 $\{\mathcal{P}(t); t \in [0, +\infty)\}$, 其中

$$\mathcal{P}(t)\phi(x, v) = \mathbb{E}_{x,v}[\phi(X(t), V(t))], \tag{2.23}$$

并分别将 $\mathcal{P}(t)$ 的强、弱无穷小生成元记为 $\mathcal{A}$ 和 $\tilde{\mathcal{A}}$, 其定义域分别为 $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ 和 $\mathcal{D}(\tilde{\mathcal{A}})$. 接下来, 定义函数族 $\mathcal{D}_k$, 它由满足如下条件的 $\varphi \in \mathcal{B}(\mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d)$ 组成:

(1) 存在有限集 $E_\varphi \subseteq \mathbb{Z}^p$ 和紧集 $F_\varphi \subseteq \mathbb{R}^d$, 使得

$$\varphi(x, v) = 0, \quad (x, v) \in (\mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d) \setminus (E_\varphi \times F_\varphi);$$

(2) 对任意 $x \in \mathbb{Z}^p$, 有 $\varphi(x, \cdot) \in \mathcal{C}^k(\mathbb{R}^d)$.

这样, 在本节中令 $\phi \in \mathcal{D}_2$, 而 ψ 和 $\mathcal{T}$ 的形式仍由 (2.14) 和 (2.15) 给出, 进而得到弱无穷小生成元 $\tilde{\mathcal{A}}$ 在 $\mathcal{D}_2$ 上的形式:

定理 5 $\mathcal{D}_2 \subseteq \mathcal{D}(\tilde{\mathcal{A}})$ 并在 $\mathcal{D}_2$ 上有 $\tilde{\mathcal{A}} = \mathcal{L}$, 其中

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\phi(x, v) &= \left(\sum_{i=1}^d f_i \frac{\partial \phi}{\partial v_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \sum_{k=1}^r g_{i,k} g_{j,k} \frac{\partial^2 \phi}{\partial v_i \partial v_j} \right)(x, v) \\ &\quad + \sum_{j=1}^q (\phi(x + \nu_j, v) - \phi(x, v)) \lambda_j(x, v). \end{aligned} \quad (2.24)$$

证明 由定理 3 可知,

$$\begin{aligned} \frac{\mathbb{E}_{x,v}[\phi(X(t), V(t))] - \phi(x, v)}{t} &= \frac{\sum_{l=0}^{\infty} \mathcal{T}^l \psi(t; x, v, 0) - \phi(x, v)}{t} \\ &= \frac{\psi(t; x, v, 0) - \phi(x, v)}{t} + \frac{\mathcal{T}\psi(t; x, v, 0)}{t} + \sum_{l=2}^{\infty} \frac{\mathcal{T}^l \psi(t; x, v, 0)}{t}. \end{aligned}$$

由 (2.14) 不难看到,

$$\begin{aligned} &\psi(t; x, v, 0) - \phi(x, v) \\ &= \mathbb{E} \left[\phi(x, \Phi_x(t; v, 0)) \exp \left(- \int_0^t \lambda(x, \Phi_x(h; v, 0)) dh \right) \right] - \phi(x, v) \\ &= \mathbb{E}[\phi(x, \Phi_x(t; v, 0)) - \phi(x, v)] + \mathbb{E} \left[\phi(x, \Phi_x(t; v, 0)) \left(1 - \exp \left(- \int_0^t \lambda(x, \Phi_x(h; v, 0)) dh \right) \right) \right]. \end{aligned}$$

由于 $\phi(x, \cdot) \in \mathcal{C}_0^2(\mathbb{R}^d)$, 故由过程 $\Phi_x(t; v, 0)$ 的无穷小生成元 (参见文献 [35, 定理 8.14]) 可知,

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\mathbb{E}[\phi(x, \Phi_x(t; v, 0)) - \phi(x, v)]}{t} = \left(\sum_{i=1}^d f_i \frac{\partial \phi}{\partial v_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \sum_{k=1}^r g_{i,k} g_{j,k} \frac{\partial^2 \phi}{\partial v_i \partial v_j} \right)(x, v),$$

又 $\lambda(x, v)$ 关于 v 连续, $\Phi_x(t; v, 0)$ 关于 t 连续, 那么,

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{1}{t} \mathbb{E} \left[\phi(x, \Phi_x(t; v, 0)) \left(1 - \exp \left(- \int_0^t \lambda(x, \Phi_x(h; v, 0)) dh \right) \right) \right] = -\phi(x, v) \lambda(x, v).$$

因此, 可总结得到

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\psi(t; x, v, 0) - \phi(x, v)}{t} = \left(\sum_{i=1}^d f_i \frac{\partial \phi}{\partial v_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \sum_{k=1}^r g_{i,k} g_{j,k} \frac{\partial^2 \phi}{\partial v_i \partial v_j} \right)(x, v) - \lambda(x, v) \phi(x, v).$$

另外, 由 (2.15) 可知, $\mathcal{T}^l \psi(t; x, v, 0) = \mathcal{O}(t^l)$ 并且

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\mathcal{T}\psi(t; x, v, 0)}{t} = \sum_{j=1}^q \phi(x + \nu_j, v) \lambda_j(x, v).$$

又注意到 $\lambda(x, v) = \sum_{j=1}^q \lambda_j(x, v)$. 因此,

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\mathbb{E}_{x,v}[\phi(X(t), V(t))] - \phi(x, v)}{t} &= \left(\sum_{i=1}^d f_i \frac{\partial \phi}{\partial v_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \sum_{k=1}^r g_{i,k} g_{j,k} \frac{\partial^2 \phi}{\partial v_i \partial v_j} \right)(x, v) \\ &\quad + \sum_{j=1}^q (\phi(x + \nu_j, v) - \lambda(x, v)) \lambda_j(x, v) \end{aligned}$$

$$= \mathcal{L}\phi(x, v).$$

证明完毕. □

这实际上给出了鞅问题 $\text{MP}(\mathcal{L}, \delta_{z_0})^2$, 其中 $\mathcal{L}$ 定义域 $\mathcal{D}(\mathcal{L}) = \mathcal{D}_2$ 解的存在性.

推论 2 $Z(t)$ 是鞅问题 $\text{MP}(\mathcal{L}, \delta_{z_0})$ 的一个解, 即过程

$$M^\phi(t) = \phi(Z(t)) - \phi(Z(0)) - \int_0^t \mathcal{L}\phi(Z(h))dh$$

是一个 $\mathfrak{F}_t^Z$ -鞅.

下面考查鞅问题 $\text{MP}(\mathcal{L}, \delta_{z_0})$ 的适定性. 事实上, 强无穷小生成元 $\mathcal{A}$ 在 $\mathcal{D}_2$ 上的形式也为 $\mathcal{L}$.

定理 6 $\mathcal{D}_2 \subseteq \mathcal{D}(\mathcal{A})$, 且在 $\mathcal{D}_2$ 上有 $\mathcal{A} = \mathcal{L}$.

证明 令 $\|\phi\| = \sup_{(x,v) \in \mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d} |\phi(x, v)|$. 注意到

$$\left\| \frac{\mathcal{P}(t)\phi - \phi}{t} - \mathcal{L}\phi \right\| = \left\| \frac{1}{t} \int_0^t [\mathcal{P}(h)(\mathcal{L}\phi) - \mathcal{L}\phi]dh \right\| \leq \sup_{h \in [0, t]} \|\mathcal{P}(h)(\mathcal{L}\phi) - \mathcal{L}\phi\|.$$

由 (2.24) 不难知道, $\mathcal{L}\phi \in \mathcal{D}_0$. 由于 $\mathcal{C}_0(\mathbb{R}^d)$ 中的函数可由 $\mathcal{C}_0^2(\mathbb{R}^d)$ 中的函数一致逼近, 这意味着 $\mathcal{D}_0$ 中的函数可由 $\mathcal{D}_2$ 中的函数一致逼近. 故对任给的 $\varepsilon > 0$, 存在序列 $\mathcal{D}_2$ 中的序列 $\{\varphi_n; n \in \mathbb{N}_+\}$ 及 $N \in \mathbb{N}_+$, 使得

$$\|\mathcal{L}\phi - \varphi_N\| < \frac{\varepsilon}{4},$$

进而,

$$\sup_{h \in [0, t]} \|\mathcal{P}(h)(\mathcal{L}\phi - \varphi_N)\| \leq \frac{\varepsilon}{4}.$$

于是,

$$\begin{aligned} \sup_{h \in [0, t]} \|\mathcal{P}(h)(\mathcal{L}\phi) - \mathcal{L}\phi\| &\leq \sup_{h \in [0, t]} (\|\mathcal{P}(h)(\mathcal{L}\phi - \varphi_N)\| + \|\mathcal{P}(h)\varphi_N - \varphi_N\| + \|\varphi_N - \mathcal{L}\phi\|) \\ &\leq \frac{\varepsilon}{4} + \sup_{h \in [0, t]} \|\mathcal{P}(h)\varphi_N - \varphi_N\| + \frac{\varepsilon}{4}. \end{aligned}$$

由于

$$\sup_{h \in [0, t]} \|\mathcal{P}(h)\varphi_N - \varphi_N\| = \sup_{h \in [0, t]} \left\| \int_0^h \mathcal{P}(s)(\mathcal{L}\varphi_N)ds \right\| \leq t\|\mathcal{L}\varphi_N\|,$$

这样取 $\delta = \varepsilon(2\|\mathcal{L}\varphi_N\|)^{-1}$, 故对所有 $0 < t \leq \delta$, 有

$$\sup_{h \in [0, t]} \|\mathcal{P}(h)\varphi_N - \varphi_N\| \leq \frac{\varepsilon}{2}.$$

从而有 $\sup_{h \in [0, t]} \|\mathcal{P}(h)(\mathcal{L}\phi) - \mathcal{L}\phi\| \leq \varepsilon$. 故

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \left\| \frac{\mathcal{P}(t)\phi - \phi}{t} - \mathcal{L}\phi \right\| = 0.$$

证明完毕. □

于是, 便得到了鞅问题 $\text{MP}(\mathcal{L}, \delta_{z_0})$ 的适定性.

²⁾这里, “MP” 为 “martingale problem” 的缩写, δ_{z_0} 表示关于 $\{z_0\}$ 的单点概率测度.

定理 7 鞅问题 $\text{MP}(\mathcal{L}, \delta_{z_0})$, $\mathcal{D}(\mathcal{L}) = \mathcal{D}_2$ 具有分布意义上的唯一解.

证明 令随机过程 $\bar{Z}(t) = (\bar{X}(t), \bar{V}(t))$ 是某个概率空间 $(\bar{\Omega}, \bar{\mathfrak{F}}, \bar{\mathbb{P}})$ 上鞅问题 $\text{MP}(\mathcal{L}, \delta_{z_0})$, $\mathcal{D}(\mathcal{L}) = \mathcal{D}_2$ 的一个解. 这里首先证明

$$\bar{\mathbb{E}}[\phi(\bar{Z}(t+s)) \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z] = \mathcal{P}(s)\phi(\bar{Z}(t)), \quad t, s \in [0, +\infty), \quad (2.25)$$

其中 $\bar{\mathbb{E}}$ 是概率测度 $\bar{\mathbb{P}}$ 导出的期望, $\bar{\mathfrak{F}}_t^Z$ 为 $\bar{Z}(t)$ 的自然 σ -代数流.

定理 6 表明, 在 $\mathcal{D}_2$ 上有 $\mathcal{A} = \mathcal{L}$, 故过程

$$\bar{M}^\phi(t) = \phi(\bar{Z}(t)) - \phi(\bar{Z}(0)) - \int_0^t \mathcal{A}\phi(\bar{Z}(h))dh$$

为 $\bar{\mathfrak{F}}_t^Z$ -鞅. 这样, 由文献 [36] 第 4 章的推论 3.2 可知, 对任意正实数 α , 过程

$$e^{-\alpha t}\phi(\bar{Z}(t)) + \int_0^t e^{-\alpha h}(\alpha\mathcal{I} - \mathcal{A})\phi(\bar{Z}(h))dh$$

也是一个 $\bar{\mathfrak{F}}_t^Z$ -鞅, 其中 $\mathcal{I}$ 为 $\mathcal{B}(\mathbb{Z}^p \times \mathbb{R}^d)$ 上的恒等变换. 这样, 对任意 $s \geq 0$, 有

$$\begin{aligned} & \bar{\mathbb{E}}\left[e^{-\alpha(t+s)}\phi(\bar{Z}(t+s)) + \int_0^{t+s} e^{-\alpha h}(\alpha\mathcal{I} - \mathcal{A})\phi(\bar{Z}(h))dh \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right] \\ &= e^{-\alpha t}\phi(\bar{Z}(t)) + \int_0^t e^{-\alpha h}(\alpha\mathcal{I} - \mathcal{A})\phi(\bar{Z}(h))dh. \end{aligned}$$

令 $s \rightarrow +\infty$, 有

$$\bar{\mathbb{E}}\left[\int_0^{+\infty} e^{-\alpha h}(\alpha\mathcal{I} - \mathcal{A})\phi(\bar{Z}(h))dh \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right] = e^{-\alpha t}\phi(\bar{Z}(t)) + \int_0^t e^{-\alpha h}(\alpha\mathcal{I} - \mathcal{A})\phi(\bar{Z}(h))dh.$$

进而, 整理得到

$$\begin{aligned} \phi(\bar{Z}(t)) &= \bar{\mathbb{E}}\left[\int_t^{+\infty} e^{-\alpha(h-t)}(\alpha\mathcal{I} - \mathcal{A})\phi(\bar{Z}(h))dh \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right] \\ &= \bar{\mathbb{E}}\left[\int_0^{+\infty} e^{-\alpha h}(\alpha\mathcal{I} - \mathcal{A})\phi(\bar{Z}(t+h))dh \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right]. \end{aligned} \quad (2.26)$$

注意到 $\phi \in \mathcal{D}_2 \subseteq \mathcal{D}(\mathcal{A})$, 应用文献 [36] 第 1 章的推论 6.8, 有

$$\mathcal{P}(s)\phi = \lim_{n \rightarrow \infty} (\mathcal{I} - n^{-1}\mathcal{A})^{-[ns]}\phi, \quad s \geq 0. \quad (2.27)$$

这样, 由于 (2.26) 中的 α 是任意正数, 故可将该式中的 α 替换成正整数 n , 有

$$\begin{aligned} (\mathcal{I} - n^{-1}\mathcal{A})^{-1}\phi(\bar{Z}(t)) &= \bar{\mathbb{E}}\left[\int_0^{+\infty} n(n\mathcal{I} - \mathcal{A})^{-1}e^{-nh}(n\mathcal{I} - \mathcal{A})\phi(\bar{Z}(t+h))dh \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right] \\ &= \bar{\mathbb{E}}\left[\int_0^{+\infty} ne^{-nh}\phi(\bar{Z}(t+h))dh \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right] \\ &= \bar{\mathbb{E}}\left[\int_0^{+\infty} e^{-h}\phi(\bar{Z}(t+n^{-1}h))dh \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right]. \end{aligned}$$

所以, 对任意正整数 k , 有

$$(\mathcal{I} - n^{-1}\mathcal{A})^{-k}\phi(\bar{Z}(t)) = \mathbb{E}\left[\int_0^{+\infty} \cdots \int_0^{+\infty} \exp\left(-\sum_{l=1}^k h_l\right) \phi\left(\bar{Z}\left(t + n^{-1}\sum_{l=1}^k h_l\right)\right) dh_1 \cdots dh_k \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right].$$

作变换 $\hat{h}_m = \sum_{l=1}^m h_l$, $m = 1, \dots, k$, 则上式变为

$$\begin{aligned} (\mathcal{I} - n^{-1}\mathcal{A})^{-k}\phi(\bar{Z}(t)) &= \mathbb{E}\left[\int_0^{+\infty} \int_0^{\hat{h}_k} \cdots \int_0^{\hat{h}_2} \exp(-\hat{h}_k) \phi(\bar{Z}(t + n^{-1}\hat{h}_k)) d\hat{h}_1 \cdots d\hat{h}_{k-1} d\hat{h}_k \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\int_0^{+\infty} \frac{\hat{h}_k^{k-1}}{(k-1)!} \exp(-\hat{h}_k) \phi(\bar{Z}(t + n^{-1}\hat{h}_k)) d\hat{h}_k \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\int_0^{+\infty} \frac{h^{k-1}}{(k-1)!} e^{-h} \phi(\bar{Z}(t + n^{-1}h)) dh \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right]. \end{aligned}$$

这样,

$$(\mathcal{I} - n^{-1}\mathcal{A})^{-[ns]}\phi(\bar{Z}(t)) = \mathbb{E}\left[\int_0^{+\infty} \frac{h^{[ns]-1}}{([ns]-1)!} e^{-h} \phi(\bar{Z}(t + n^{-1}h)) dh \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right]. \quad (2.28)$$

由于 $\bar{M}_t^\phi$ 为 $\bar{\mathcal{F}}_t^Z$ -鞅, 故对任意 $t_1, t_2 \geq t$, 有

$$0 = \mathbb{E}[\bar{M}^\phi(t_1) - \bar{M}^\phi(t_2) \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z] = \mathbb{E}\left[\phi(\bar{Z}(t_2)) - \phi(\bar{Z}(t_1)) - \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{A}\phi(\bar{Z}(h)) dh \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right].$$

结合 $\frac{h^{[ns]-1}}{([ns]-1)!}e^{-h}$ 是 Gamma 分布 $\Gamma([ns], 1)$ 的概率密度函数, (2.28) 可以改写为

$$\begin{aligned} &(\mathcal{I} - n^{-1}\mathcal{A})^{-[ns]}\phi(\bar{Z}(t)) \\ &= \mathbb{E}\left[\int_0^{+\infty} \frac{h^{[ns]-1}}{([ns]-1)!} e^{-h} (\phi(\bar{Z}(t+s)) + \int_s^{n^{-1}h} \mathcal{A}\phi(\bar{Z}(t+\hat{h})) d\hat{h}) dh \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right] \\ &= \mathbb{E}[\phi(\bar{Z}(t+s)) \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z] + \mathbb{E}\left[\int_0^{+\infty} \frac{h^{[ns]-1}}{([ns]-1)!} e^{-h} \int_s^{n^{-1}h} \mathcal{A}\phi(\bar{Z}(t+\hat{h})) d\hat{h} dh \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right]. \end{aligned} \quad (2.29)$$

注意到 (2.29) 的右边的第 2 项满足

$$\begin{aligned} &\left|\mathbb{E}\left[\int_0^{+\infty} \frac{h^{[ns]-1}}{([ns]-1)!} e^{-h} \int_s^{n^{-1}h} \mathcal{A}\phi(\bar{Z}(t+\hat{h})) d\hat{h} dh \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right]\right| \\ &\leq \mathbb{E}\left[\int_0^{+\infty} \frac{h^{[ns]-1}}{([ns]-1)!} e^{-h} \|\mathcal{A}\phi\| |n^{-1}h - s| dh \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z\right] \\ &= \|\mathcal{A}\phi\| \int_0^{+\infty} \frac{h^{[ns]-1}}{([ns]-1)!} e^{-h} |n^{-1}h - s| dh \\ &= \|\mathcal{A}\phi\| \cdot \mathbb{E}\left[n^{-1} \sum_{l=1}^{[ns]} \xi_l - s\right] \\ &\leq \|\mathcal{A}\phi\| \left(\frac{[ns]}{n} \mathbb{E}\left[\left|[ns]^{-1} \sum_{l=1}^{[ns]} \xi_l - 1\right|\right] + \left|\frac{[ns]}{n} - s\right|\right) \rightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty), \end{aligned}$$

其中 $\xi_1, \dots, \xi_{[ns]}$ 为 $[ns]$ 个独立的参数为 1 的指数分布随机变量. 因此, 结合 (2.27), 对 (2.29) 取 $n \rightarrow \infty$ 的极限便得到 (2.25).

最后说明鞅问题的解的唯一性. 定义 $\mathbb{R}$ 上函数

$$\theta_n(y; a, b) = \begin{cases} 1, & y \in [a, b], \\ 0, & y \in (-\infty, a - n^{-1}] \cup [b + n^{-1}, +\infty), \\ \text{点 } (a - n^{-1}, 0) \text{ 到点 } (a, 1) \text{ 的线性插值,} & y \in (a - n^{-1}, a), \\ \text{点 } (b, 1) \text{ 到 } (b + n^{-1}, 0) \text{ 的线性插值,} & y \in (b, b + n^{-1}), \end{cases}$$

其中 $n \in \mathbb{N}_+$, $-\infty < a < b < +\infty$. 所以, $\theta_n(\cdot; a, b) \in \mathcal{C}_0(\mathbb{R})$ 且 $\theta_n(\cdot; a, b)$ 逐点收敛到 $\chi_{[a,b]}(\cdot)$. 故对任意 $\bar{x} \in \mathbb{Z}^p$ 及 $\mathbb{R}$ 上 d 个有界闭区间 $[\bar{v}_{1,l}, \bar{v}_{2,l}]$, $l = 1, \dots, d$, 函数 $\varphi_n(x, v) = \chi_{\{\bar{x}\}}(x) \prod_{l=1}^d \theta_n(v_l; \bar{v}_{1,l}, \bar{v}_{2,l})$ 属于 $\mathcal{D}_0$, 其中 v_l 为 v 的第 l 个分量. 由于 $\mathcal{D}_0$ 中的函数可以由 $\mathcal{D}_2$ 中的函数一致逼近, 而 $\varphi_n \in \mathcal{D}_0$, 故可将 (2.25) 中的 ϕ 替换为 φ_n 得到

$$\mathbb{E}[\varphi_n(\bar{Z}(t+s)) \mid \bar{\mathfrak{F}}_t^Z] = \mathcal{P}(t)\varphi_n(\bar{Z}(t)),$$

从而有

$$\mathbb{E}[\varphi_n(\bar{Z}(t+s)) \mid \mathcal{F}_t^Z] = \mathbb{E}[\varphi_n(\bar{Z}(t+s)) \mid Z(t)],$$

进而,

$$\mathbb{E}[\varphi_n(\bar{Z}(t+s)) \mid \bar{Z}(t) = z] = \mathcal{P}(t)\varphi_n(z) = \mathbb{E}[\varphi_n(Z(t+s)) \mid Z(t) = z].$$

对该式取 $n \rightarrow \infty$ 的极限, 由控制收敛定理可得

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\left(\bar{X}(t+s) = \bar{x}, \bar{V}(t+s) \in \prod_{l=1}^d [\bar{v}_{1,l}, \bar{v}_{2,l}] \mid \bar{Z}(t) = z\right) \\ = \mathbb{P}\left(X(t+s) = \bar{x}, V(t+s) \in \prod_{l=1}^d [\bar{v}_{1,l}, \bar{v}_{2,l}] \mid Z(t) = z\right). \end{aligned}$$

这意味着 $\bar{Z}(t)$ 也是时齐 Markov 过程且与 $Z(t)$ 具有相同的有限维分布, 即鞅问题 $\text{MP}(\mathcal{L}, \delta_{z_0})$ 具有分布意义下的唯一性. 证明完毕. $\square$

2.5 过程的算法实现

将 $Z(t)$ 的构造改写成算法形式, 便得到耦合扩散过程样本轨道的数值算法:

(1) 初始化: 令 $T \leftarrow t_0$, $X \leftarrow x_0$, $V \leftarrow v_0$.

(2) 生成跳跃间隔时间: 生成与一个与 Wiener 过程 $W(t)$ 独立的 $(0, 1]$ - 均匀分布随机数 u , 再令

$$S \leftarrow \inf \left\{ s \geq 0 : \int_0^s \lambda(X, \Phi_X(T+h; V, T)) dh \geq -\ln u \right\},$$

其中 $\Phi_X(T+h; V, T)$ 是随机微分方程

$$dU(t) = f(X, U(t))dt + g(X, U(t))dW(t), \quad U(T) = V$$

T 时刻从 V 出发的解, 可用随机微分方程的数值模拟方法进行实现. 若 $\inf$ 后的集合为空集, 则令 $S \leftarrow +\infty$, $T \leftarrow +\infty$ 并结束迭代.

(3) 选出反应序号: 更新 $V \leftarrow \Phi_X(T + S; V, T)$, 再寻找 $J \in \{1, \dots, q\}$ 满足

$$\sum_{j=1}^{J-1} \lambda_j(X, V) \leq \lambda(X, V)u' < \sum_{j=1}^J \lambda_j(X, V),$$

其中 u' 是再次生成的一个与 Wiener 过程独立的 $(0, 1]$ - 均匀分布随机数.

(4) 更新 $T \leftarrow T + S$, $X \leftarrow X + \nu_J$.

(5) 如果 $T < t_{\text{fin}}$, 则回到步骤 2.5; 否则, 结束迭代.

3 讨论与展望

本文的结论是为解决随机混合系统 (如带有扩散项的宏观膜电位动力学和亚宏观离子通道随机开关相互耦合的随机 HH 神经元方程) 的样本轨道的数值算法而奠定严格的数学理论基础. 在没有扩散项时, Ding 等^[34] 中已对逐段决定的马氏过程 (即 PDMP) 的样本轨道在 $[0, 1]^\infty$ 的 Lebesgue 测度空间上进行了构造, 并通过对跳跃间隔的对数生存函数的线性插值逼近给出了一种较以往文献精度更高、随机数使用率更低的数值算法. 从本文的讨论中可以看出耦合扩散过程与 PDMP 有着紧密的关系, 因此, 我们类比 PDMP 定义及构造方法对耦合扩散过程的样本轨道在一个由 $[0, 1]^\infty$ 上的 Lebesgue 测度空间与 $\mathcal{C}(\mathbb{R}_+, \mathbb{R}^r)$ 上的 Wiener 测度空间所形成的乘积空间中进行了构造. 当然, 由于扩散过程与随机跳过程的耦合, 耦合扩散过程的构造方式要比 PDMP 更加复杂, 所得过程的存在唯一性、Markov 性、相邻跳跃间隔的分布、无穷小生成元及相应鞅问题的适定性的证明难度也比 PDMP 更大. 尽管如此, 本文提出的构造方式, 相比以往文献, 更直观地揭示了耦合扩散过程样本轨道的形态, 也直接导出了其理想化的精确数值算法. 这实质上是将 Gillespie 算法的直接法^[1,2] 推广到化学反应网络的耦合扩散过程. 这样的精确算法也为进一步给出跳适应的近似算法打下坚实基础.

关于耦合扩散过程的数值模拟, 本文给出的算法只是一种理想化的精确算法, 实际的应用需要解决第 2.5 小节中步骤 2 的击中时问题 (hitting time problem). 我们可以对照文献 [34] 中关于 PDMP 的几种算法, 考虑相邻跳跃间隔的对数生存函数的逼近方法. 另外也可将 Gillespie 算法的其他一些等价算法推广到化学反应网络的耦合扩散过程, 并尝试得到计算效率较高且近似程度较好的近似算法. 这将是后续的工作之一.

参考文献

- 1 Gillespie D T. A general method for numerically simulating the stochastic time evolution of coupled chemical reactions. J Comput Phys, 1976, 22: 403–434
- 2 Gillespie D T. Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions. J Phys Chem, 1977, 81: 2340–2361
- 3 Gibson M A, Bruck J. Efficient exact stochastic simulation of chemical systems with many species and many channels. J Phys Chem, 2000, 104: 1876–1889
- 4 Anderson D F. A modified next reaction method for simulating chemical systems with time dependent propensities and delays. J Chem Phys, 2007, 127: 214107
- 5 Gillespie D T. Approximate accelerated stochastic simulation of chemically reacting systems. J Chem Phys, 2001, 115: 1716–1733
- 6 Gillespie D T. Stochastic simulation of chemical kinetics. Annu Rev Phys Chem, 2007, 58: 35–55
- 7 Li T. Analysis of explicit tau-leaping schemes for simulating chemically reacting systems. Multiscale Model Simul, 2007, 6: 417–436
- 8 Anderson D F. Incorporating postleap checks in tau-leaping. J Chem Phys, 2008, 128: 054103

- 9 Haseltine E L, Rawlings J B. Approximate simulation of coupled fast and slow reactions for stochastic chemical kinetics. *J Chem Phys*, 2002, 117: 6959–6969
- 10 Rao C V, Arkin A P. Stochastic chemical kinetics and the quasi-steady-state assumption: application to the gillespie algorithm. *J Chem Phys*, 2003, 118: 4999–5010
- 11 Haseltine E L, Rawlings J B. On the origins of approximations for stochastic chemical kinetics. *J Chem Phys*, 2005, 123: 164115
- 12 Cao Y, Gillespie D T, Petzold L R. Adaptive explicit-implicit tau-leaping method with automatic tau selection. *J Chem Phys*, 2007, 126: 224101
- 13 Mastny E A, Haseltine E L, Rawlings J B. Two classes of quasi-steady-state model reductions for stochastic kinetics. *J Chem Phys*, 2007, 127: 094106
- 14 Srivastava R, Haseltine E L, Mastny E, et al. The stochastic quasi-steady-state assumption: Reducing the model but not the noise. *J Chem Phys*, 2011, 134: 154109
- 15 Hamill O P, Marty A, Neher E, et al. Improved patch-clamp techniques for high-resolution current recording from cells and cell-free membrane patches. *Pflügers Arch*, 1981, 391: 85–100
- 16 Hodgkin A L, Huxley A F. Currents carried by sodium and potassium ions through the membrane of the giant axon of loligo. *J Phys*, 1952, 116: 449–472
- 17 Skaugen E, Walløe L. Firing behaviour in a stochastic nerve membrane model based upon the Hodgkin-Huxley equations. *Acta Phys Scand*, 1979, 107: 343–363
- 18 Hille B. *Ion Channels of Excitable Membranes*. Sunderland: Sinauer Associates, 2001
- 19 Hille B. *Ionic Channels of Excitable Cells*. Sunderland: Sinauer Associates, 1992
- 20 Davis M H A. Piecewise-deterministic markov processes: A general class of non-diffusion stochastic models. *J Royal Statist Soc Ser B (Methodological)*, 1984, 46: 353–388
- 21 Davis M H A. *Markov Models and Optimization*. London: Chapman & Hall, 1993
- 22 Hou Z, Liu G. *Markov Skeleton Processes and Their Applications*. Beijing: Science Press, 2005
- 23 Qian M, Zhang B, Guo Z. The semigroup generated by the coupled diffusion equation. *Kexue Tongbao*, 1984, 29: 1279–1283
- 24 Qian M, Zhang B. Multi-dimensional coupled diffusion process. *Acta Math Appl Sin Engl Ser*, 1984, 1: 168–179
- 25 Guo Z, Qian M, Qian M. Minimal coupled diffusion process. *Acta Math Appl Sin Engl Ser*, 1987, 3: 58–69
- 26 Yin G G, Zhu C. *Hybrid Switching Diffusions: Properties and Applications*. New York: Springer, 2010
- 27 Bensoussan A, Lions P. Optimal control of random evolutions. *Stochastics*, 1981, 5: 169–190
- 28 Skorokhod A V. *Asymptotic Methods in the Theory of Stochastic Differential Equations*. Providence: Amer Math Soc, 1987
- 29 章复熹. 耦合扩散过程. 博士学位论文. 北京: 北京大学, 2004
- 30 Qian M, Zhang F. Entropy production rate of the coupled diffusion process. *J Theoret Probab*, 2011, 24: 729–745
- 31 Zhu C, Yin G. Asymptotic properties of hybrid diffusion systems. *SIAM J Control Optim*, 2007, 46: 1155–1179
- 32 Chow C C, White J A. Spontaneous action potentials due to channel fluctuations. *Biophys J*, 1996, 71: 3013–3021
- 33 Anderson D F, Ermentrout B, Thomas P J. Stochastic representations of ion channel kinetics and exact stochastic simulation of neuronal dynamics. *J Comput Neurosci*, 2015, 38: 67–82
- 34 Ding S, Qian M, Qian H, et al. Numerical simulations of piecewise deterministic markov processes with an application to the stochastic Hodgkin-Huxley model. *J Chem Phys*, 2016, 145: 244107
- 35 钱敏平, 龚光鲁. *随机过程论*. 北京: 北京大学出版社, 1997
- 36 Ethier S N, Kurtz T G. *Markov Processes: Characterization and Convergence*. New York: John Wiley & Sons, 1986

Construction of sampling trajectories of coupled diffusion processes and its simulation algorithm

DING ShaoJie, HE GuoLong & ZHANG XueJuan

Abstract Coupled diffusion process is a system in which a diffusion process is coupled with a Markov jumping process. To simulate such a hybrid process, we consider a product space formed by a Lebesgue space on $[0, 1]^\infty$ and a Wiener space on $\mathcal{C}(\mathbb{R}_+, \mathbb{R}^r)$, and intuitively construct a coupled diffusion process on this probability space. We

prove that the constructed process is a Markov process, and present the probability distribution of the residual lifetime as well as the joint probability distribution of the next reaction index and the residual lifetime. We further consider the infinitesimal generator and the martingale problem of the process, and prove the solution to the martingale problem is unique in distribution. Based on the sampling process we constructed, we propose an algorithm to simulate the coupled diffusion process.

Keywords coupled diffusion process, construction of sampling trajectory, distribution of residual lifetime, martingale problem

MSC(2010) 60G20, 60H35

doi: 10.1360/N012017-00155