应用随机方法课程报告

赵天钧

学号：2321018013

2024 年 6 月 16 日

1 论文内容简介

本论文题为《首达重置的优化》，于 2020 年 7 月刊登在 PRL 上。作者研究了这样一类模型：一个从原点出发的扩散过程，每次到达某固定上界 L 时就自动被重置回到原点。这一模型被称为首达重置。作者进一步分析了两种模型，一是半无穷情况 (即在负半轴不设限制) 的纯扩散过程 (即不含漂移项)，作者推导得出了其在各时刻的概率密度函数并指出其非稳性。二是两侧有界情形的一般扩散过程，此时漂移率被视为外部可控参量。作者研究了一个以状态为奖励，以重置为惩罚的目标函数如何得以达到最优化 (也即论文标题的含义)。最后，作者也对含时滞的重置过程进行了简要讨论。

2 本报告工作

受篇幅限制，PRL 上的文章普遍省略推导过程与细节。本报告首先补充了文章的完整数学推导，并在原作者进行近似处理的地方展开讨论。其次本报告也对原作者提出的模型框架进行了推广，对于原论文不足之处也做了探讨。为方便起见，在陈述原论文结论和方法时，报告将使用灰色字体，而本报告的工作和一般认为熟知的结论则将使用黑色字体，以示区分。

3 数学准备

3.1 Laplace 变换

对定义域在 $[0,\infty)$ 上的函数 $f(t)$, 定义其 Laplace 变换为 (默认积分存在)

$$L[f(t)] = F(s) = \int_0^\infty f(t)e^{-st}dt$$

由于 Laplace 变换有位移性质，积分性质和微分性质，它是解 PDE 和 SDE 的常用方法之一。简言之，通过对时间变量做 Laplace 变换，可以将 PDE 中对时间求导项转化为对变换后函数乘上新变元 s，仅剩对 x 项有关求导，从而将问题转化为对 ODE 的求解。最后再将解通过 Laplace 逆变换得出原方程的解。下面处理一类函数的 Laplace 变换。考虑如下形式的积分

$$\int_0^\infty \frac{exp(-at-\frac{b}{t})}{\sqrt{t}}dt.$$

首先做变量代换 $t=\sqrt{\frac{b}{a}}$，得到

$$\int_0^\infty \frac{exp(-\sqrt{ab}(t+\frac{1}{t}))}{\sqrt{t}}\sqrt[4]{\frac{b}{a}}dt.$$

记 $I_1=\int_0^\infty \frac{exp(-c(t+\frac{1}{t}))}{\sqrt{t}}dt$, 变量代换 $t=\frac{1}{\tau}$ 可得 $I_2=\int_0^\infty \frac{exp(-c(t+\frac{1}{t}))}{t\sqrt{t}}dt=I_1$. 于是有

$$I_1=\frac{1}{2}(I_1+I_2)=\int_0^\infty \frac{t+1}{2t\sqrt{t}}exp(-c(t+\frac{1}{t}))dt.$$

最后作变量代换 $s=\sqrt{t}-\frac{1}{\sqrt{t}},\ ds=\frac{1}{2}(\frac{1}{t}+\frac{1}{t\sqrt{t}})dt,\ t+\frac{1}{t}=s^2+2$ 得到

$$I_1=\int_{-\infty}^{+\infty} exp(-c(s^2+2))ds = exp(-2c)\sqrt{\frac{\pi}{c}}.$$

将此结果代回最一般情形表达式，得到

$$\int_0^\infty \frac{exp(-at-\frac{b}{t})}{\sqrt{t}}dt = exp(-2\sqrt{ab})\sqrt{\frac{\pi}{a}}. \tag{1}$$

特别地，取 $a=s$ 即得一类函数的 Laplace 变换函数表达式。

3.2 扩散过程

参考教材在 3.5.2 和第五章的讨论，当跳跃项 $W(z|x,t)=0$ 时，$Chapman-Kolmogorov$ 方程化归为 $Fokker-Planck$ 方程。它是被最广泛研究的一类随

机过程，被称为扩散过程 (或对流扩散过程)。它的 (一维版本)SDE 可化简为

$$dX(t) = vdt + \sqrt{2D}dW(t).$$

其中 v 称为漂移系数，刻画物质的对流过程；D 称为扩散系数，刻画物质的扩散过程。它的 $Fokker - Planck$ 方程版本也即：

$$\partial_t p = -\partial_x(vp) + D\partial_{xx}p.$$

其中 p 是物质的概率密度。特别地，当漂移系数恒零时，可得纯扩散过程。此时扩散强度 D 也可视为对时间的压缩系数，并化归为标准布朗运动。我们认为以下结论是熟知的：对标准布朗运动，其首次到达某一高度 L 和扩散时间的联合密度函数为

$$F(L,t) = \frac{L}{\sqrt{2\pi t^3}} e^{-L^2/2t}.$$

而带扩散强度的版本则为

$$F_1(L,t) = \frac{L}{\sqrt{4\pi D t^3}} e^{-L^2/4Dt}. \tag{2}$$

这个结论可由自由扩散的镜像翻折原理证明。引入 $M(t)$ 表示扩散过程在前 t 时间内到达过的最高点，则其在 t 时刻处于 x 位置的每条轨迹，都可在 $M(t) = m$ 高度处进行翻折，对应于一条在 t 时刻处于 $2m - x$ 的轨迹，反之亦然。而首达 m 时小于等于 t 等价于 $M(t) \geq m$. 由此可推得联合密度函数

$$Q(x,m,t) = \frac{2m - x}{\sqrt{4\pi D^3 t^3}} e^{-(2m-x)^2/4Dt}. \tag{3}$$

4 具体推导

4.1 半无穷情形

下面考虑下方无界，而上方有重置上界 L 的扩散问题。由等式 (2)，可卷积推广得到 n 次首达时的联合密度函数为

$$F_n(L,t) = \int_0^t F_{n-1}(L,\tau) F_1(L, t-\tau) d\tau.$$

由于卷积在拉普拉斯变换下成为乘法，因此有较简便的

$$\widetilde{F_n}(L,s) = \widetilde{F_1}(L,s)^n.$$

对表达式 (2), 使用结论 (1) 的 I_2 形式，b 取 $L^2/4D$, 得到 $\widetilde{F_1}(L,s) = e^{-\sqrt{sL^2/D}}$, 进一步简记为 $\widetilde{F_1}(L,s) = e^{-y_L}, y_L = \sqrt{sL^2/D}$. 于是$\widetilde{F_n}(L,s) = e^{-ny_L}$.这可以等价地理解为，一个无重置的自由扩散首次到达 nL 高度的过程。

进一步，我们推导半无穷情形时扩散过程的分布函数。在正半轴上 ($0 \leq x \leq L$)，它处于位置 x 时，总存在唯一的 n，使得它经历了 n 重置而尚未进行第 $n+1$ 次重置。因此结合 (3) 有

$$\begin{aligned} P(x,t) &= \sum_{n\geq 0} \int_{x+nL}^{(n+1)L} Q(x+nL,m,t)dm \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \sum_{n\geq 0} [e^{-(x+nL)^2/4Dt} - e^{[x-(n+2)L]^2/4Dt}]. \end{aligned} \tag{4}$$

作者的方法略有不同，他先计算了无重置情形 ($n=0$) 的概率 $G(x,L,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}[e^{-x^2/4Dt} - e^{(x-2L)^2/4Dt}]$，随后用卷积得到前向更新方程

$$P(x,t) = G(x,L,t) + \sum_{n\geq 1} \int_0^t F_n(L,\tau) G(x,L,t-\tau) d\tau.$$

随后作者又推导了反向更新方程 $P(x,t) = G(x,L,t) + \int_0^t F_1(L,\tau)P(x,t-\tau)d\tau$. 两边同时做拉普拉斯变换，可得 $\widetilde{P}(y,s) = \frac{\widetilde{G}(y,y_L,s)}{1-\widetilde{F}_1(y_L,s)}$. 此处 G 可用 (1) 中 I_1 型变换公式，得到

$$\widetilde{P}(y,s) = \frac{1}{\sqrt{4Ds}} \frac{e^{-y} - e^{2y_L - y}}{1 - e^{y_L}}. \tag{5}$$

其中 $y = x\sqrt{s/D}$. 再将上式泰勒展开后作拉普拉斯逆变换，同样可以得到 (4)。

进一步，我们希望研究 $t \to \infty$ 时的分布情况，这也即在拉普拉斯变换后令 $s \to 0^+$. 于是作者将 (5) 作小量近似估计，可得

$$\widetilde{P}(x,t) = \frac{L - x - L(L-x)\sqrt{s/D} + \mathcal{O}(s)}{L\sqrt{sD} + \mathcal{O}(s)}, s \to 0^+. \tag{6}$$

作者在这里进一步做了不太严谨的近似，得到

$$\widetilde{P}(y,s) \approx \frac{L-x}{L\sqrt{sD}},\ P(x,t) \approx \frac{L-x}{L\sqrt{\pi Dt}}.$$

可见，作者在这步近似中忽略了分子中 $\sqrt{s}$ 量级项，这在 $s \to 0^+$ 的渐近意义上是可行的。然而这步近似在有限意义上，是用一个线性函数去逼近指数相关函数，误差相当明显。可以考虑在 $[0,L]$ 上对 (4) 关于 x 积分，得到

$$\int_0^L P(x,t)dx = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_0^L e^{-x^2/4Dt} dx = \frac{1}{2} erf(\frac{L}{\sqrt{4Dt}}).$$

而对作者给出的近似式作积分则得到

$$\int_0^L P(x,t)dx = \frac{1}{2} \frac{L}{\sqrt{\pi Dt}}.$$

易见作者所做的其实是用线性函数近似误差函数 $erf(x)$ 在 0 附近的渐近表现，是较为粗糙的。最后我们考虑 t 时间内恰进行 n 次重置的概率，它可以通过将至少进行 n 次重置和至少进行 $n+1$ 次重置的概率相减得到，即 $Q_n = \int_0^t [F_n(L,\tau) - F_{n+1}(L,\tau)]d\tau = erf(\frac{(n+1)L}{\sqrt{4Dt}}) - erf(\frac{nL}{\sqrt{4Dt}})$.记 $\mathcal{N}(t) = E(Q_n)$ 为平均 (期望) 重置次数，则有倒向更新方程

$$\mathcal{N}(t) = \int_0^t F_1(L,\tau)[1 + \mathcal{N}(t-\tau)]d\tau.$$

与之前过程类似，做拉普拉斯变换后做小量近似，再做逆变换可得

$$\mathcal{N}(t) \approx \sqrt{4Dt/\pi L^2}.$$

这同样是对严格结果

$$\mathcal{N}(t) = \sum_{n\geq 1}[n \cdot erf(\frac{(n+1)L}{\sqrt{4Dt}}) - n \cdot erf(\frac{nL}{\sqrt{4Dt}})]$$

的线性近似。另外，也能用更新方程算得 $x \leq 0$ 的分布 $P(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}[e^{-x^2/4Dt} + e^{-(x-L)^2/4Dt}]$, 作者指出由于终止点在负半轴的路径都能通过翻着对应于一条或从 L 出发或从 0 出发的自由扩散，因此该表达式也可视为对这两个概率分布的平均。

4.2 两侧有界情形的优化问题

作者接下来考虑两侧有界情形，其中上界 L 是一个搬运边界，将从上方逸出的物质搬运到 0 处；下界 0 是一个反射边界，将从下方逸出的物质直接反射回上方。用 $Fokker - Planck$ 方程表示即为

$$\partial_t c + v\partial_x c = D\partial_{xx}c + \delta(x)(-D\partial_x c + vc)|_{x=L}. \tag{7}$$

初边值条件为

$$\begin{aligned} D\partial_x c - vc|_{x=0} &= \delta(t) \\ c(L,t) = c(x,0) &= 0. \end{aligned} \tag{8}$$

这里 c 可以理解为物质的浓度，也可以理解为概率分布。初边值条件的第一条即为反射边界条件，第二条则为上下界初值设置。我们可以对此方程关于时间使用拉普拉斯变换，将其转化为关于 x 的二阶 ODE，并利用特征线方法求解。求解对应特征值后可得通解形式为 $e^{vx/2D}(C_1 e^{\sqrt{v^2+4Ds}x/2D} + C_2 e^{-\sqrt{v^2+4Ds}x/2D})$ 再代入初边值条件得到

$$\widetilde{c}(x,s) = \frac{2e^{vx/2D} sinh[w(L-x)]}{M - 2Dwe^{Pe}}.$$

这里 $w=\sqrt{v^2+4Ds}/2D, M=2Dwcosh(Lw)+vsinh(Lw), Pe=vL/2D$ 作者又重复了一次他的线性近似方法，在 $s\to 0^+$ 条件下近似得到

$$c(x)\approx\frac{1}{L}\frac{1-e^{-2Pe(L-x)/L}}{1-Pe^{-1}e^{-Pe}sinh(Pe)}.$$

而重置次数也能由倒向方程推得为

$$\widetilde{N}(s)=\frac{2Dwe^{Pe}}{s[M-2Dwe^{Pe}]}.$$

并线性近似为

$$\mathcal{N}(T)\approx\frac{4Pe^2}{2Pe-1+e^{-2Pe}}\frac{T}{L^2/D}.$$

有了这两个近似结论，对于优化目标

$$\mathcal{F}=\lim_{T\to\infty}[\frac{1}{L}\int_0^T x(t)dt-C\mathcal{N}(T)].$$

就可以调整 $Pe=vL/2D$，将其最大化 (目标函数中的积分项表示每时获得一个正比于当前 x 的奖励，第二项则表示每次重置获得一个惩罚 C) 作者给出了数值模拟结果，展示不同惩罚大小情况下，目标函数随 Pe 的变化情况。简单地说，惩罚较大时，最大值点在负半轴取到，且最大值较小，意味着最佳策略的漂移项 v 应当为负，倾向于减灭物质规避重置；反之惩罚较小时，则应该倾向于增添物质，意味着较多的重置。

5 讨论与推广

作者还进一步讨论了带时滞的重置过程，以及此时的最优化目标函数问题，这里不作详细展开。我认为有以下几点可以进行更仔细的分析：
1、作者进行优化分析时，只是定性地图示了不同惩罚下最优 Pe 的取法，并没有给出最优处 Pe 取值的显式表达式
2、作者所讨论的可控变量为 Pe, 我不了解它的物理含义，然而从表达式可以看出，优化目标不仅是 Pe 的函数，也是 L 和 D 的函数，因此应当讨论 v,D,L 对优化目标的综合影响，而不只是 Pe 的影响
3、作者设置的优化目标中，对 x 的奖励是线性的，这未必符合实际问题的背景，目标函数应该有更广泛的形式
4、作者的所有近似操作都是一阶的 (线性的)，我已经在文章中提到了，这是比较粗糙的，应该进行更细致的估计
5、重置过程可以推广到双向的，即在负半轴上有一个下界 $-K$，也将物质重置

回原点，推导此时的稳态分布

6、重置过程可以是二维的，此时也能够用拉普拉斯变换将问题化简，只不过会将一维情形的指数基础解系替换成贝塞尔函数型基础解系。