可逆
马尔可夫过程

钱 敏 侯振挺等著

湖南科学技术出版社

可逆马尔可夫过程

KENI MAERKEFU GUOCHENG

作者（按姓氏笔划为序）

陈木法 汪培庄 侯振挺 郭青峰

钱 敏 钱敏平 龚光鲁

湖南科学技术出版社

1979 · 长沙

可逆马尔可夫过程

作者（按姓氏笔划为序）
陈木法 汪培庄 侯振挺 郭青峰
钱　敏 钱敏平 龚光鲁
装帧设计：张小平

*

湖南科学技术出版社出版
湖南省新华书店发行
湖南省新华印刷二厂印刷

*

1979年8月第1版第1次印刷
字数：158,000　印数：1——7,000　印张：7.75
统一书号：13204·5　定价：0.85元

内 容 提 要

本书是作者们关于马氏链与马氏过程的可逆性的研究成果总结。

第一至四章分别讨论马氏链、Q—过程、生灭过程、由实轴上的二阶微分算子生成的马氏过程的可逆性。第五章讨论不可逆马氏链的环流分解与环量分布。第六章从场的观点讨论了马氏链和马氏过程的有势性。

本书可供高等学校研究概率论及泛函的师生、数学工作者与有关自然科学工作者阅读参考。

序

近年来，远离平衡态问题的研究引起了广泛的重视，并有不少物理学家，物理化学家和生物化学家积极从事这方面的研究工作，取得了不少引人注目的成果。在数学上，*E. Nelson* 1958年首先提出了扩散过程的可逆性概念与对称化问题，这相当于平衡态统计物理中的细致平衡情况。

我们企图通过对马氏过程和马氏链可逆性的研究，为远离平衡的定常系统提供一个数学模型。本书就是我们研究成果的初步总结，其中的大部分内容是第一次公开发表。本书共分六章，第一至四章分别讨论马氏链、Q 过程、生灭过程和实轴上二阶微分算子生成的马氏过程的可逆性，第五章讨论了不可逆马氏链的环流分解与环量分布（这里的环流与物理中的*Tomita*环流类似），研究的结论与生物化学的有关结果比较吻合。第六章建立了一种抽象场，并从场的观点出发，详细地研究了马氏链、马氏过程、Q 过程等的有势性、可配称性和可逆性等问题。

在马氏过程的可逆性方面还有许多值得深入研究的问题，诸如高维连续状态的马氏过程的可逆性与环流（*H. Ito*于1978年开始研究这个问题）、环量分布与自由能转换问题的关系，以及它们在生物化学中的应用等都有广阔的前景。

我们希望本书的出版能引起有关同志对这个问题的兴趣。

湘潭大学付教授杨向群同志细致地审阅了全书原稿并提出了许多宝贵意见，在此表示衷心的谢意。

作者1979.4

目　录

绪　言

马氏过程的可逆性与数学物理

具有极限分布的马氏过程是一类限制很强但在物理问题中常见的随机过程，它具有Markov性而且是渐近强平稳的。随时间的增长趋于定态(不一定是平衡态)的统计物理现象一般都导致这种随机过程。首次指出有必要把这类过程分出来给与专门讨论的是Chandrasekhar〔1〕，但是在数学文献中迄今缺少深入研究这类过程的论著。本书讨论离散时间的马氏链、由Q矩阵生成的马氏链、以及由微分算子生成的扩散过程，着重点是区分并刻划可逆和不可逆两种情况，并通过无穷小特征（Q矩阵或微分算子的系数)来表达可逆性的充要条件。可逆马氏过程一定是可对称化的，对称马氏过程的一般讨论已见于专著〔2〕；但可逆性还要求过程具有一个不变的概率分布，在过程的构造中还必须涉及唯一性的问题，所以只有在生灭过程和一维扩散的情况，可逆性问题才接近于彻底解决。本书把国内有关于这方面的工作（绝大部分尚未公开发表）汇编集中，以便征求广大数学工作者的意见和指教，也希望能引起他们对这个数学分支的兴趣。

1.可逆性与环流的物理背景

通过随机过程，尤其是高斯过程来讨论平衡态临近的不可逆现象起源于不少物理问题，特别是以布朗运动为代表的涨落问题。自从爱因斯坦提出布朗运动的物理模型后，Wiener，Ito等人做了大量

的数学工作，到五十年代初形成了一个数学上完整并严谨的领域，即扩散过程与随机微分方程。与此同时，*Onsager*以高斯模型为主要工具，系统地把随机过程用作讨论不可逆过程热力学的基础；在1953年前后他和*Machlup*一同提出了 *Onsager—Machlup* 原理，它事实上是随机过程概率密度的一个泛函表达式，这是一个数学命题；这一类公式还可以推广到非线性系统，关于详细情况请参阅*Graham*的著作〔3〕。进一步发展高斯模型用以研究化学物理问题的还有*Keiser*〔4〕，远离热力学平衡态的理论是分别由*Haken*等人对激光〔5〕，*Prigogine* 等人对化学振荡提出的〔6〕，现在研究这方面问题的还有日本的*Hasegawa*等〔7〕。什么是远离平衡态，*Prigogine* 认为必须是由平衡态通过分枝产生。分枝现象目前只对确定性的动力系统才有明确的含义，用它来说明远离平衡态的做法有一定的局限性。结合远离平衡态的概念，*Prigogine*还提出具有正熵产生率的定常开系统的说法，并以此定义散逸结构。在非平衡态的领域内，不同的著者常用类似的术语来命名不同的物理概念，例如不少作者用散逸系统来称呼有耗散的体系（*Emch*〔8〕，*Davies*〔9〕），他们所谓的散逸状态是包含热力学平衡态的。*Prigogine*所研究的有序现象分空间和时间两方面，如果只考虑时间的有序问题，情况比较单纯，这时数学上的马尔可夫链和扩散过程是一个能经受严格推敲的抽象模型。本书结合不可逆性研究了这个数学模型，其结果当然是初步的；只对几种特殊的情况（例如生灭过程，一维扩散）得到了接近完全的结果。按照作者们的想法，马链或扩散主要描写的是宏观现象，但也可以是亚宏观现象（例如生物大分子的状态）。在讨论有序现象时，第一步是区分热力学平衡和非热力学平衡。物理上的细致平衡条件是区分这个差别的有效标志。马氏过程的可逆性就是细致平衡这个物理概念的数学表达。我们知道，热力学平衡一般是通过细致平衡达到

的〔10〕，不细致平衡的定常状态应该有什么特征？回答是必须出现环流．这个结论在马链的情况已可以用定理的形式写出来〔本书第五章〕.定理的结论是任何一个平稳的马链一定可以分解成为细致平衡和环流两部分，细致平衡部分对时间反演来说是对称的，环流部分则是反对称的．一个马链若只含细致平衡部分，就成为一个对时间可逆的随机过程，也就是说，它的统计特性对时间逆转来说是不变的．这些讨论说明非热力学平衡的体系只要能达到定态，就在一定程度上表现出时间的有序性．

对马尔可夫链也可以引入熵产生率的概念，有环流的马链具有正的熵产生率，反之亦然．所以有环流的马链是一个远离平衡态的模型；我们不称之为散逸结构，因为它不同于 *Prigogine* 的散逸结构，后者是指系统的子系通过相互合作产生的宏观上的周期现象．我们认为序的概念可以有几个层次．最低的一层是脱离热力学平衡产生环流的状态，这种序当然不是单纯的微观特征，但也不一定在宏观上有明显的表现，但如果把大分子的状态称为亚宏观态，则这种序是在亚宏观意义下的确存在的．

2.可逆性、环流与自由能转移

为了进一步说明上一段的结论，我们谈谈与大分子的状态密切有关的生化现象．在生化反应中，明显地表现出了对于时间的不可逆性，甚至可以说，不可逆性是生命运动的特点之一．以环流平衡保持定常的状态在物理学中所见不多，在化学中也还不是公认为普遍存在的，但在生物化学中，环（*Cycles*）的出现则是确定无疑的．能否把马氏链的环流理论作为统一这类现象的一个数学模型，这样说法目前可能根据不足，但是在本书写作的过程中，作者查阅的一批文献说明，生物体中自由能转换的 *Hill* 模型〔11〕的确提供了一个有说服力的例子．从 1966 年 到1978年，***T. L. Hill***，***R. M. Simons***， *Y.Chen*等人把生物大分子的结合和转变用一个亚宏观的模型一般地表达出来，所得的结论可以用来说明肌肉收缩的功能，以及*Hodgekin—Huxley* 模型中钾、钠离子主动迁移穿透生物膜的机理，他们还指出按原来*Hodgekin—Huxley*的平衡态设想，则生物膜中电流及电压的功率谱应该有*Lorentz*线型，但是*H.M.Fishman*〔12〕在关于鱿鱼触角轴突(*Axon*)的实验中可能观察到了功率谱的呈现尖峰的现象〔13〕，〔14〕，环流模型将为此提供恰当的解释。这方面的工作的初步总结是1977年*Hill* 的书〔11〕。本书的第一、第五章可以作为〔11〕第一、二章的数学理论基础。

在自由能转换的不可逆过程中〔11〕,必须伴随着自由能的耗散，*Hill*的模型是一个分析得较为彻底并密切结合生化现象的亚宏观散逸有序系统的例子，在这里熵产生就是自由能耗散。与此接近的文献有 *Schnakenberg*〔15，16〕，〔16〕中的论述更着重于原理和一般方法，但是缺少与实验的比较。阅读本书第一到第五章时，参照上述文献〔11—16〕，可以较好地了解环流理论联系实际问题的现状。和这些文献相比，本书第一，第五章除了数学上的严格性之外，还在于明确叙述并证明了环流分解定理，作为特殊情况，当不出现环流部分时，易证马氏链是细致平衡的。分解定理的每个环上有相应的流和力，从而有一个熵产生率，而一个不可逆马氏链的熵产生率等于它包含的各个环流上熵产生率的和。一个马氏链中包含的环的个数，在一定意义下是唯一的。所以马氏链的每一个环也可以看作一个自由度。马氏链的每一个状态，我们称之为亚宏观状态，这就是说它对应于大分子的某种特征，这种特征所确定的微观状态还有许许多多，但是这种特征并非宏观可观测的量，而是介于宏观参数和微观量之间的一个物理参数。对应于马链的每一个状态 i，有平稳分布$p_i(\infty)$，如果记

$$p_i(\infty)=e^{-A_i/\kappa T}\left(\sum_i e^{-A_i/\kappa T}\right)^{-1},$$

则*Hill*指出在细致平衡条件下A_i的确是系统在状态i的自由能. 这样马氏链中讨论的迁移概率可以和量子论中微粒子从一个能阶到另一个能阶的跃迁比拟. 但是这里涉及的不是真实的微观能阶, 而是亚宏观系统自由能的能阶. 这种跃迁在细致平衡时一般只引起自由能的耗损. 但当环流出现时会放出能量,这可能对应于生物萤光现象. *Hill* 书的不少章节讨论了如何在不细致平衡的条件下把这一类现象表述为一定的规律, 并运用这些规律解释生物体的机能. 他所讨论的例子除了前面所说的肌肉收缩问题和钾离子的主动迁移外, 还有*Mitchell*用来研究叶绿体和腺体的化学渗透模型. *Mitchell* 的学说现在已为大多数生物化学工作者所接受并在1978年被列为重大科学成就之一; 比起*Prigogine*的理论来, 这里涉及的问题具有较直接的生物学涵义. *Hill* 还指出, 他的方法如用于研究视紫膜, 由于实际生物体相对地说比较简单, 将会导致更确定的结论. *Hill* 的方法缺少一个坚实明晰的理论结构作为基础, 本书第五章试图用马链的语言提供这样一个结构(环流现象的完整数学模型). 环流是能量转换的形式, 也是最简单但最明确的一种形式, 从本书第五章的讨论可以看出环量分布律和*Bolzmann*的能量分布律在处理方法上很类似. 后者讨论的是平衡状态下的配分, 前者讨论的则是运动方式的配分. 在*Hill*的理论中, 环还被用作相互作用的基本单元 (象固体中的元激发), 这里涉及许多有趣的生物物理规律, 有兴趣的读者可参阅〔11—16〕及其中所引的文献.

给定一个Q矩阵, 由它所构造的Q过程在什么条件下是可逆的, 这样的可逆过程有多少, 这些问题在生灭过程的情况已经得出了最终的答案(本书第三章). 对一般马氏链来说, 也有不少结果 (本书

第一章)，这里引入了示性数，不但可由它讨论可逆性的条件，还有助于提供求出平稳分布的方法. 为了阅读本书这一部分章节，最好能先了解一下生灭过程构造论的分析方法〔17〕. 有关齐次可列马尔可夫过程，侯振挺、郭青峰两同志不久前出了一本专著，该书重点在于唯一性准则与构造论，但是要把 Q 过程的可逆性和环流现象彻底讨论清楚，构造具有一定环流特征的 Q 过程，并找到环流分解的有效途径，〔18〕是可读的较全面的论著，此外也可以参阅 *Reuter*的文章〔19〕，以及〔20〕，〔21〕. 从生灭过程和马链来了解可逆性及环流现象，可以为进一步研究一般的扩散过程中对应的问题提供有效的信息. 例如，一维扩散的结果和生灭过程的相应结果是完全吻合的. 一般 Q 过程的可逆性判据及处理方法则可作为 n 维扩散过程的借鉴. 链的模型目前也为许多实际工作者所采用，*Haken*, *Gortz* 等人工作中的某些结果实际上可由马氏链的可逆性定理得出〔22〕，〔23〕；本书对涉及的概念和命题给了数学上严格的定义和证明，并且讨论了较困难的存在性及唯一性问题.

3.扩散过程的可逆性

在扩散过程的情况，首次提出可逆性概念的是*E. Nelson*〔24〕. 因为在一般的情况，微分算子生成半群的问题比较复杂〔25〕,〔26〕，也不可能得到唯一性的有效判据，所以从微分算子构造可逆扩散过程的问题不能彻底解决. 如果考虑扩散的相空间为园周，则情况特别简明. 可以证明〔27〕，算符

$$L\equiv\frac{d}{d\theta}\left(a(\theta)\frac{d}{d\theta}\right)+b(\theta)\frac{d}{d\theta}+c(\theta)$$

$$(a(\theta)>0,\ c(\theta)<0;\ 0\leq\theta<2\pi)$$

生成唯一一个可逆扩散过程的充分必要条件是

$$\begin{cases} c(\theta)=0, \\ \int_0^{2\pi} b(\theta)d\theta=0. \end{cases}$$

在本书第四章中基本上解决了在R_1上相对应的问题．这里重新整理了*Feller*关于微分算子生成半群的重要工作，使之适用于在算符中出现吸收项$c(x)$的情况，并得到了最小过程可逆的充要条件，进一步还求出局部边值下一般过程可逆的充要条件．所得结果和生灭过程的有关命题完全一致．如果算符中出现$c(x)$，则可逆过程的存在要求$c(x)$不是定号的，即有吸收也有放射，在这种情形如何构造可逆过程的问题尚有待解决．

4．可逆扩散过程研究的前景

一维可逆扩散问题的研究虽然导致十分完整的结论，但其应用价值却是有限的，因为这时实际上并不可能出现环流现象（如不考虑在无穷远处的流入）；在园周上虽然可以存在环流，这类现象仅仅在锁相环的相位扩散和跳周中有所体现〔28〕．如果讨论多维扩散过程的可逆性，首先要求漂移系数满足一个全微分条件——位势条件〔29〕．前面已经讲过，在这个条件下由生成算符构造可逆过程的问题不可能彻底解决，因为在全空间抛物型方程没有基本解系，其*Cauchy*问题的唯一性也不易处理．但是，有一点是值得指出的，就是表达可逆性的位势条件使得微分算符可以对称化，所以马尔可夫半群的生成元将是自共轭的．为了构造这一类马尔可夫过程可以广泛利用自伴算子的理论．如果不考虑极限分布的存在，这一类问题属于对称马尔可夫过程和*Dirichlet*空间的范围〔30〕．如果要求过程是可逆的，则还须有极限分布存在——过程有一个不变测度，这样的随机过程有许多很强的性质，如强平稳性，遍历性等等．从个别具体的例子来看〔8〕，这类过程中包含了大量特例，它们是强混合型

的，它们的算子谱可以完整地分解为点谱部分和绝对连续部分，它们的功率谱可以用算子的本征展开写出来，它们可以嵌入到一个保守的力学体系中去——即可视为一保守动力系统分出来的子系统．这一类问题的讨论和解决，除了作为了解散逸系统的数学基础之外，还具有直接提供计算途径的特点，所以从理论和应用两方面来看都是很有意义的．

给定一个微分式和一个与之相适应的分布来构造可逆马尔可夫过程的问题，本质上等价于给定基态和能量的形式表达后构造能量算子或量子力学系统的问题．把这两种提法统一起来，可以使得两个基本上隔离的学科领域在看法和方法上互相补充．事实上，对一大类给定在 $L_2(d\mu)$ 上的扩散现象（μ为不变测度），可以在 $L_2(dx)$ 上构造与之严格等价的量子力学系统，前者的漂移系数$\vec{b}(x)$与后者的位势 $V(\vec{x})$之间互换公式为〔31〕

$$V(x)=\frac{1}{4}\vec{b}(\vec{x})\cdot\vec{b}(\vec{x})+\frac{1}{2}\nabla\cdot\vec{b}(\vec{x}).$$

这个公式提供了用量子力学多体问题的方法来处理高维扩散方程的途径〔32〕．

如果考虑相空间是无穷维的，相应的问题直接联系到公理化量子场论的构造问题．通过*Dirichlet*空间来研究这个问题的有*Abelverio*〔33〕，他所得的结果类似于*Glimme*的二维模型．

5.两个物理应用

直接应用扩散过程可逆性模型并为这类过程提供了大量有兴趣的例子的实际问题有两类：锁相环的噪声分析和激光器的相关特性．这两类问题的数学处理方法有着触目的相似．它们都是从一组随机微分方程出发，通过*Fokker-plank*方程来讨论相应强平稳过程的相关特性和谱．在可逆性条件不成立即有环流出现时，物理上称为出现偏

调（*detuning*）。偏调在锁相环中导至单向跳周〔28〕，在激光中偏调与线型有密切的关系〔29〕。在锁相和激光理论中出现的典型马氏过程是二维的，它们的生成算符分别为〔34，29〕：

$$L_1=A\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}-B\left[\frac{\partial}{\partial\phi}\left(\beta-\sin\phi\right)\right]-\widetilde{a}(\phi-z)\left(\frac{\partial}{\partial\phi}+\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$(0\leqslant\phi<\pi,\ -\infty<z<\infty;\ A,\ B,\ \widetilde{a}\geqslant0),$$

$$L_2=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}-\beta(a-r^2)\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$-\left[a+\left(\frac{a^2}{4}-2\right)r^2-\frac{a^2}{2}r^4+\frac{1}{4}r^6\right]$$

$$(a>0,\ \beta\geqslant0;\ 0<r<\infty,\ 0\leqslant\phi<z\pi),$$

这里L_1的特点是二阶导数部分是退化的，L_2的特点是在$r=0$具有奇性。构造这一类微分式生成的马氏过程（当$\widetilde{a}$，$\beta=0$时是可逆的）的问题，尤其是唯一性问题是锁相和激光理论的数学基础部分，其相关函数和谱的计算则是必不可少的实际问题，这类问题在数学上严格的处理至今尚无完整的结果。和一维问题相比较，我们可以大致看出困难之所在。仔细阅读本段所引的文献将有助于提出新的随机过程的问题。

最近，我们从场论的观点出发，重新考查了“可逆性”等问题（详见第六章），看来在这方面还有一系列工作可做。

作为这个粗浅的绪言的结束，我们希望说明本书的作者都是数学工作者，我们感到从一定的实际背景来建立马氏过程的数学模型可以导出一些新的想法，但是我们对所涉及的物理现象，尤其是大

量生、化现象是一知半解的，错误一定很多，更谈不上所得的结果能有多少具体用途．恳切希望各界同志们批评指正．

钱　敏

于北京大学1979年3月

参　考　文　献

〔1〕 Chandrasekhar, S. (1943) Rev. Mod. Phys. 15, 1.

〔2〕 Silverstein, M. L. (1974) Symmetric Markov Processes (Lecture Notes in Math. 426, Springer).

〔3〕 Graham, R. (1973) Springer tracts in Modern Physics, 66 (Springer).

〔4〕 Keiser, J. (1975, 1976). J. Chem. Phys. 63, 398; 64, 1679.

〔5〕 Haken, H. (1977) Synergetics, An Introduction (Nonequilibrium Phase Transitions and Self—organization in Ph. Ch. and Biology) (Springer) 及其中文献.

〔6〕 Nicolis, G. and Prigogine, I. (1977) Self—organization in Nonequilibrium Systems (J. Wiley and Sons).

〔7〕 Hasegawa, H. (1976, 1977) Progress of Theort. Phys. 55, 90; 56, 44; 57, 1523; 58, 128.

〔8〕 Emch, G. (1973) J. Math. Phys. 14, 1775.

〔9〕 Davies, E.B. (1976) Quantum Theory of Open Systems (Academic Press).

〔10〕 王竹溪（1978）统计物理学导论（人民教育出版社）.

〔11〕 Hill, T. L. (1977) Free Energy Transduction in Biology 及其中所引文献 (Acad. Press)