

脱碳动力学随机微分方程解过程的转移概率密度

第一数学教研室 秦明达 杜才难

摘 要

文中由带随机系数的脱碳动力学方程求出了相应的Fokker—Planck方程,求解得到了脱碳随机过程的转移概率密度函数,从而论证了该过程是一个Gauss—Markov过程。本文最后还提出了将所求得的转移概率密度应用于转炉炼钢过程后期终碳控制的某些设想。

主要符号说明

k_i 容量传质系数(或 K_i 的均值);

K_i 随机容量传质系数;

C, C_0 钢水随机含碳量和随机初始碳量;

$B_i(t)$ Brown运动过程(或Wiener过程);

D_i $B_i(t)$ 的扩散系数之半;

t_0, t_e 冶炼初始时刻和终吹时刻;

t_1, t_2 第1、2阶段交界点和第3、4阶段交界点;

c_1, c_2 与 t_1, t_2 相应的碳值;

t', c' 吹炼后期的某时刻及其相应的钢水含碳量的取值;

$a_n(x', t)$ n 阶增量矩;

$\alpha_n(x', t)$ n 阶导出矩;

$f(x, t | x', t')$ 已知 t' 时过程 $X(t)$ 取值 x' 转移到 t 时刻过程取值为 x 的转移概率密度函数;

$\Phi(x, t | x', t')$ 相应于 $f(x, t | x', t')$ 的条件特征函数;

$F(x, t | x', t')$ 相应于 $f(x, t | x', t')$ 的转移概率分布函数;

$E\{C, t | c', t'\}$ 或 a 条件期望函数;

$D\{C, t | c', t'\}$ 或 σ^2 条件方差函数;

$\delta(\cdot)$ δ 函数;

$F(\cdot), F^{-1}(\cdot)$ 付氏变换及付氏逆变换。

前 言

关于LD法炼钢过程中脱碳动力学随机模型的问题, [1]、[2]中已做了一定的工

作。特别是 [2] 中已将模型推广到系数 k_i ($i=1, 2, 3$) 为平方可积随机过程的情形。为简单和实用起见, 本文仅限于讨论 k_i ($i=1, 2, 3$) 为二阶矩随机变量 (即 $E\{K_i^2\} < \infty$) 的下述模型:

$$dC(t) = \begin{cases} -K_1 t dt + dB_1(t), & t_0 \leq t < t_1, \quad C(t_0) = C_0; \\ -K_2 t dt + dB_2(t), & t_1 \leq t < t_2; \\ -K_3 C(t) dt + dB_3(t), & t_2 \leq t \leq t_{\infty}. \end{cases} \quad (1)$$

其中 t_0 为初始时刻, 其余符号与 [2] 中一致。

本文中研究随机模型解过程统计性质的方法与 [1]、[2] 中不同, 可以不必去解 (1) 式中三个分段的 Itô 方程, 也不必进行解过程的矩函数的复杂计算, 而直接由模型 (1) 导出相应的 Fokker—Planck 方程 (即所谓“向前方程”, 简称 F—P 方程), 这是一个确定性的偏微分方程, 在一定的初始条件和边界条件下求解, 即可得到脱碳过程 $C(t)$ 的转移概率密度函数 $f(c, t | c', t')$, 由此便可获得大量有用的统计信息。这种方法与 [1]、[2] 中所运用的矩函数方法相辅相成, 在随机过程和随机微分方程的理论和应用上具有重要的意义。它对于处理非随机系数的 Itô 方程是可行和有效的, 这已为人们所熟知。但是, 对于象 (1) 式中的三个方程那样带有随机系数的 Itô 方程来说, 这种方法的可行性至今在一般专著和文献中很少进行系统的讨论。因此, 本文旨在通过模型 (1) 的 F—P 方程的推导和求解具体说明: 转移概率密度的方法对于随机系数的 Itô 方程同样适用, 并且也是有效的。当然, 作为应用性的讨论, 本文不可能过多地涉及随机系数 Itô 方程的理论研究。这方面已有的部分成果可参看 [3]、[4]、[5]、[6]。

一、模型 (1) 的 F—P 方程

首先注意到模型 (1) 中三个分段方程均属随机系数的 Itô 方程, 其一般形式为,

$$\begin{cases} dX(t, \omega) = f(t, \omega, X(t, \omega)) dt + g(t, \omega, X(t, \omega)) dB(t, \omega), \\ X(0, \omega) = X_0(\omega), \quad (\omega \in \Omega). \end{cases} \quad (2)$$

其中 X_0 满足 $E\{X_0^2\} < \infty$, 且 X_0 与 $dB(t)$ 相互独立。为简单计, 下面讨论中都略写 ω 。

设方程 (2) 的解过程为 $X(t)$, $f(x, t)$ 是它的一阶密度函数。由于条件密度函数与条件特征函数之间有付氏变换关系: (令 $\Delta x = x - x'$)

$$\begin{aligned} f(x, t + \Delta t | x', t) &= F^{-1} [\phi(u, t + \Delta t | x', t)] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iu\Delta x} \phi(u, t + \Delta t | x', t) du, \end{aligned} \quad (3)$$

定义 $a_n(x', t) \triangleq E\{[X(t + \Delta t) - X(t)]^n | x', t\}$, 称它为 $X(t)$ 的 n 阶增量矩, 并在 $u=0$ 附近展开函数 ϕ 为 Taylor 级数, 则 (3) 式变成

$$\begin{aligned} f(x, t + \Delta t | x', t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n(x', t)}{2\pi n!} \int_{-\infty}^{\infty} (iu)^n e^{iu\Delta x} du \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} a_n(x', t) \frac{\partial^n}{\partial x^n} [\delta(\Delta x)]. \end{aligned} \quad (4)$$

但

$$f(x, t + \Delta t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, t + \Delta t | x', t) f(x', t) dx', \quad (5)$$

将(4)式代入(5)式, 运用 δ 函数性质可得

$$\begin{aligned} f(x, t + \Delta t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} [a_n(x, t) f(x, t)] \\ &= f(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} [a_n(x, t) f(x, t)], \end{aligned} \quad (6)$$

定义 $\alpha_n(x, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{a_n(x, t)}{\Delta t}$, 称它为 $X(t)$ 的 n 阶导出矩, 并将(6)式右端第一项移至左端后, 两边除以 Δt 并取极限, 可得

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} [\alpha_n(x, t) f(x, t)] = 0 \quad (7)$$

据[3]、[4], 容易推知: 方程(2)的解过程 $X(t)$ 具有马氏性, 并是连续的扩散过程, 因而当 $n \geq 3$ 时, 导出矩

$$\alpha_n(x, t) = 0, \quad [7] \quad (8)$$

又因 $X(t)$ 为马氏过程, 故转移概率密度函数满足 Kolmogoroff 方程:

$$\begin{aligned} f(x_3, t_3 | x_1, t_1) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x_3, t_3 | x_2, t_2) f(x_2, t_2 | x_1, t_1) dx_2 \\ &\quad (t_1 < t < t_2) \end{aligned} \quad (9)$$

于是只要转移概率密度函数 $f(x, t | x', t')$ 的一、二阶导数满足相应的正则条件, 则必定也要满足(7), 即

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [\alpha_1(x, t) f] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\alpha_2(x, t) f], \quad (10)$$

$$\text{其中 } \alpha_i(x, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} E\{ [\Delta X(t)]^i | X(t) = x \}, \quad (i = 1, 2), \quad (11)$$

由方程(2)可知

$$\Delta X(t) = f(t, x) \Delta t + g(t, x) \Delta B(t) + o(\Delta t), \quad (12)$$

代入(11)中可得

$$\begin{aligned} \alpha_i(x, t) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} E\{ [f(t, x) \Delta t + g(t, x) \Delta B(t) \\ &\quad + o(\Delta t)]^i | X = x \}, \quad (i = 1, 2), \end{aligned} \quad (13)$$

于是, 在某些独立性假定下, 容易求得

$$\alpha_1(x, t) = E\{ f(t, x) | x = x \} = E\{ f(t, \omega, x) \}, \quad (14)$$

$$\alpha_2(x, t) = 2D E\{ g^2(t, \omega, x) \}, \quad (2D \text{ 为扩散系数}). \quad (15)$$

方程(10)即为随机系数 Itô 方程(2)所对应的 F—P 方程, 形式上虽然与非随机系数 Itô 方程的 F—P 方程类似, 但在确定导出矩 $\alpha_i(x, t)$ 时, 必须考虑系数 f 和 g 的随机性而与后者有所不同。

现在具体求出模型(1)中三个方程相应的 F—P 方程。运用(14)、(15)式即可计算出三个方程的一、二阶导出矩分别为

阶段 \ 导出矩	$\alpha_1(x, t)$	$\alpha_2(x, t)$
第一阶段	$-k_1 t$	$2D_1$
第二阶段	$-k_2$	$2D_2$
第三阶段	$-k_3 c$	$2D_3$

其中 $k_i = E\{K_i\}$, $2D_i$ 为 S.P.B_i(t) 的扩散系数, ($i=1, 2, 3$)。

将表中 α_i 的值代入方程 (10) 中即得各阶段的 F—P 方程分别为

$$\text{第一阶段} \begin{cases} \frac{\partial f_1(c, t | c_0, t_0)}{\partial t} = k_1 t \frac{\partial f_1}{\partial c} + D_1 \frac{\partial^2 f_1}{\partial c^2}, \\ f_1(c, t_0 | c_0, t_0) = \delta(c - c_0), \\ f_1(\pm \infty, t | c_0, t_0) = 0. \end{cases} \quad (16)$$

$$\text{第二阶段} \begin{cases} \frac{\partial f_2(c, t | c_1, t_1)}{\partial t} = k_2 \frac{\partial f_2}{\partial c} + D_2 \frac{\partial^2 f_2}{\partial c^2}, \\ f_2(c, t_1 | c_1, t_1) = \delta(c - c_1), \\ f_2(\pm \infty, t | c_1, t_1) = 0. \end{cases} \quad (17)$$

$$\text{第三阶段} \begin{cases} \frac{\partial f_3(c, t | c_2, t_2)}{\partial t} = k_3 \frac{\partial}{\partial c}(cf_3) + D_3 \frac{\partial^2 f_3}{\partial c^2}, \\ f_3(c, t_2 | c_2, t_2) = \delta(c - c_2), \\ f_3(\pm \infty, t | c_2, t_2) = 0. \end{cases} \quad (18)$$

上述三个方程的边界条件的物理意义是假定在无穷远处概率流有一吸收壁。

二、F—P 方程的求解

采用付氏变换法和 Liouville 方法解上面三个 F—P 方程^[6]。

首先对于方程 (16) 求解。注意到转移概率密度函数 $f_1(c, t | c_0, t_0)$ 的付氏变换是条件特征函数

$$\begin{aligned} \phi_1(u, c | c_0, t_0) &= F[f_1(c, t | c_0, t_0)] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{iut} f_1(c, t | c_0, t_0) dt \end{aligned} \quad (19)$$

在边界条件 $f_1(\pm \infty, t | c_0, t_0) = 0$ 下, 不难证明:

$$\left. \begin{aligned} F\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right) &= \frac{\partial \phi_1}{\partial t}, & F\left(\frac{\partial f_1}{\partial c}\right) &= iu\phi_1, \\ F\left(t \frac{\partial f_1}{\partial c}\right) &= iut_1\phi_1, & F(cf_1) &= -u \frac{\partial \phi_1}{\partial u}, \\ F\left(\frac{\partial^2 f_1}{\partial c^2}\right) &= -u^2\phi_1. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

于是将方程 (15) 进行付氏变换后变为

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi_1}{\partial t} = (ik_1 u t - D_1 u^2) \phi_1, \end{cases} \quad (21)$$

$$\phi_1(u, t_0 | c_0, t_0) = F[\delta(c - c_0)] = e^{iuc_0}. \quad (22)$$

此即一阶偏微分方程初值问题。用Liouville方法可写出方程(21)所对应的常微分方程:

$$\frac{d\phi_1}{(ik_1 u t - D_1 u^2) \phi_1} = dt, \quad (23)$$

求解, 并利用初始条件(22)可得特解为

$$\phi_1 = e^{iu[c_0 - 1/2k_1(t^2 - t_0^2)] - D_1 u^2(t - t_0)} \quad (24)$$

则

$$\begin{aligned} f_1(c, t | c_0, t_0) &= F^{-1}(\phi_1) = F^{-1}[e^{iu[c_0 - 1/2k_1(t^2 - t_0^2)]} \cdot e^{-D_1 u^2(t - t_0)}] \\ &= \delta\left\{c - \left[c_0 - \frac{1}{2}k_1(t^2 - t_0^2)\right]\right\} * \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{C^2}{2D_1(t-t_0)}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\{c - [c_0 - 1/2k_1(t^2 - t_0^2)]\}^2}{4D_1(t-t_0)}}, \quad (t_0 \leq t < t_1), \end{aligned} \quad (25)$$

由(25)式右端可看出: 第一阶段解过程 $C(t)$, $(t_0 \leq t < t_1)$ 是一个 Gauss 过程, 其条件均值函数与条件方差函数^[8]分别为

$$\begin{aligned} E\{C, t | c_0, t_0\} &= c_0 - \frac{1}{2}k_1(t^2 - t_0^2) \\ D\{C, t | c_0, t_0\} &= 2D_1(t - t_0) \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} E\{C, t | c_0, t_0\} \\ D\{C, t | c_0, t_0\} \end{aligned}} \right\} (t_0 \leq t < t_1). \quad (26)$$

同理, 可求得方程(17)的解为

$$f_2(c, t | c_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\{c - [c_1 - k_1(t - t_1)]\}^2}{4D_2(t - t_1)}}, \quad (27)$$

故第二阶段解过程 $C(t)$, $(t_1 \leq t < t_2)$ 也是一个 Gauss 过程且条件均值函数和条件方差函数分别为

$$\begin{aligned} E\{C, t | c_1, t_1\} &= c_1 - k_1(t - t_1) \\ D\{C, t | c_1, t_1\} &= 2D_2(t - t_1) \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} E\{C, t | c_1, t_1\} \\ D\{C, t | c_1, t_1\} \end{aligned}} \right\} (t_1 \leq t < t_2). \quad (28)$$

最后, 求解方程(18), 在运用Liouville方法时, 其计算过程相对前两个方程来说要复杂一些。对方程(18)中F—P方程作付氏变换后, 得

$$\frac{\partial \phi_3}{\partial t} = -k_3 u \frac{\partial \phi_3}{\partial u} - D_3 u^2 \phi_3, \quad (29)$$

则对应的常微分方程组为

$$\frac{dt}{1} = \frac{du}{k_3 u} = \frac{d\phi_3}{-D_3 u^2 \phi_3}. \quad (30)$$

对方程

$$\frac{dt}{1} = \frac{du}{k_3 u}$$

积分, 可得

$$u = \Psi_1 e^{k_3 t}, \quad (\Psi_1 \text{ 为任意函数})$$

则

$$\Psi_1 = ue^{-k_3 t} \quad (31)$$

再由方程

$$\frac{du}{k_3 u} = -\frac{d\phi_3}{D_3 u^2 \phi_3}$$

积分, 可得

$$\phi_3 = \Psi_2 e^{\frac{-D_3 u^2}{2k_3}}, \quad (\Psi_2 \text{ 为任意函数})$$

则

$$\Psi_2 = \phi_3 e^{\frac{D_3 u^2}{2k_3}} \quad (32)$$

于是. 方程 (30) 之通解为

$$\Phi(\Psi_1, \Psi_2) = \Phi\left(ue^{-k_3 t}, \phi_3 e^{\frac{D_3 u^2}{2k_3}}\right) = 0, \quad (33)$$

为求方程 (18) 之特解, 先对初始条件作付氏变换后, 得 $t = t_2$ 时

$$\phi_3 = e^{iuc_2},$$

然后由联立方程组

$$\begin{cases} \Psi_1 = ue^{-k_3 t} \\ \Psi_2 = \phi_3 e^{\frac{D_3 u^2}{2k_3}} \\ t = t_2 \\ \phi_3 = e^{iuc_2} \end{cases} \quad (34)$$

消去 u, t , 即得

$$\Psi_1 = ue^{-k_3 t_2}, \quad (35)$$

$$\Psi_2 = e^{i\Psi_1 e^{k_3 t_2} c_2 + \frac{D_3 \Psi_1^2 e^{-2k_3 t_2}}{2k_3}} \quad (36)$$

再将 (34) 中第一、二式代入 (36), 可得

$$\phi_3 e^{\frac{D_3 u^2}{2k_3}} = e^{iuc_2 e^{-k_3(t-t_2)} + \frac{D_3 u^2 e^{-2k_3(t-t_2)}}{2k_3}}.$$

故方程 (30) 之特解为

$$\phi_3 = e^{iuc_2 e^{-k_3(t-t_2)}} - \frac{u^2}{2} \left\{ \frac{D_3}{k_3} \left[1 - e^{-2k_3(t-t_2)} \right] \right\}, \quad (37)$$

则特三阶段的转移概率密度函数为

$$f_3(c, t | c_2, t_2) = F^{-1}(\phi_3) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{k_3 \left\{ c - \left[c_2 e^{-k_3(t-t_2)} \right] \right\}^2}{2D_3 \left[1 - e^{-2k_3(t-t_2)} \right]}}, \quad (38)$$

因此,第三阶段的解过程 $\mathbf{C}(t)(t_2 \leq t \leq t_0)$ 也是一个Gauss过程,其条件均值和条件方差函数分别为

$$\left. \begin{aligned} E\{ \mathbf{C}, t | \mathbf{C}_2, t_2 \} &= \mathbf{C}_2 e^{-k_3(t-t_2)}, \\ D\{ \mathbf{C}, t | \mathbf{C}_2, t_2 \} &= \frac{D_3}{k_3} \left[1 - e^{-2k_3(t-t_2)} \right] \end{aligned} \right\} \quad (39)$$

由以上推导,可总结出以下定理:

定理:以(1)式为模型的脱碳S.P. $\mathbf{C}(t)$, $(t_0 \leq t \leq t_0)$ 是一个 Gauss—Markov 过程。

三、将转移概率密度函数用于后期碳控制的某些设想

在转炉吹炼后期,假定通过取样,知道了在 t' 时刻的碳含量 c' ,则可通过第三阶段的转移概率密度函数 f , (即(38)式)去估计下面的转移概率

$$\begin{aligned} P\{ \mathbf{C} \leq c, t | c', t' \} &= F(c, t | c', t') \\ &= \int_0^c f(s, t | c', t') ds \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^c e^{-\frac{(s-a)^2}{2\sigma^2}} ds = \Phi\left(\frac{c-a}{\sigma}\right), \end{aligned} \quad (40)$$

其中 a 、 σ^2 分别为(39)式中的条件期望和条件方差(只要把(39)式中 $\mathbf{C}_2$, t_2 分别改为 c' , t' 即可)。(40)式说明,转移概率可由正态分布表直接查出。

进一步还可求出碳含量转移到某个区间 $[A, B]$ 内的概率:

$$P\{ A \leq \mathbf{C} \leq B, t | c', t' \} = \Phi\left(\frac{B-a}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{A-a}{\sigma}\right). \quad (41)$$

不妨假定 $[A, B]$ 就是碳的合格范围,那么上式即是在 t 时刻拉碳命中率的理论估计式。生产中当然希望(41)式所表示的概率愈大愈好。注意到这个概率是 t 的函数,因此可提出下列具有实践意义的问题:当 t 为何值时,一次拉碳的命中率最高?实际上,在 t' 时刻取样知道了钢水的含碳量 c' 后,即可通过(39)式求得 a 和 σ^2 ,同时预先假定一系列可能的终吹时刻:

$$t_{e1}, t_{e2}, \dots, t_{en}, \quad (t_{ei} > t', i = \overline{1, n})$$

将其代入(41)式(以 t_{ei} 代替 t),计算出相应的各个拉碳命中率 $P_1, P_2, \dots, P_n$;经比较后,找出最大者,即 $\max\{P_1, P_2, \dots, P_n\}$ 。设其相应的时刻为 t_* ,则 t_* 显然满足下列关系:

$$P\{ A \leq \mathbf{C} \leq B, t_* | c', t' \} = \max_{(i=\overline{1, n})} \{ P\{ A \leq \mathbf{C} \leq B, t_{ei} | c', t' \} \}, \quad (42)$$

如果在 $t=t_*$ 时,钢水温度已达成钢标准,则 t_* 就是理想的拉碳时刻,可期望获得较高的命中率。而上述一系列计算均可通过电算在极短时间内迅速完成。

以上是运用转移概率密度函数予测终吹时刻,以求获得较高拉碳命中率的一些初步设想。是否可行?还有待于实践来检验。

参 考 文 献

- [1] 秦明达: 用随机微分方程构造脱碳动力学随机模型, 北京钢铁学院学报1982年第4期, P.P.89~100;
- [2] 杜才难: 带有随机系数的脱碳动力学方程的某些探讨。(待发表)
- [3] B.L.Rozovsky, A note on strong solution of S.D.E.with stochastic coefficient, Lecture notes in control and information sciences 25(stochastic differential systems Filtering and control) 1980.
- [4] A.Friedman, Stochastic differential equations and applications. Vol.1, P.P.117~123, 1975;
- [5] I.I.Gihman, A.V.Skorohod, Stochastic differential equations. Chapter 2 § 7, 1972;
- [6] 吴占生、石北源: 关于随机微分方程理论的几个问题。(1978年全国概率论学术会议资料);
- [7] 张炳根、赵玉芝: 科学和工程中的随机微分方程. 海洋出版社, 1980. P.P.228~246;
- [8] 王梓坤: 随机过程论. 科学出版社, 1978. P.P.25~32.

The transition probability density function of stochastic process of decarbonization kinetic stochastic differential equations

Qin Ming-da Du Cai-Nan

Abstract

The transition probability density function of stochastic decarbonization process is obtained by Fokker-Planck equations, which is deduced from decarbonization kinetic equations with a random from rate coefficients. It is shown that the stochastic process does belong to Gauss-Markov process. The suggestions of application of transition probability function to control end point carbon content for Oxygen steel making are presented.