拟生灭过程的敏感性分析

Anna Aksamit [*] [†] Ma lgorzata M. O'Reilly [‡] [§] Zbigniew Palmowski [¶] [‖]

2023年2月7日

arXiv:2302.02227v1 [math.PR] 4 Feb 2023

1 引言

拟生灭过程（QBD）是矩阵解析方法理论中的一类基础马尔可夫模型，其状态空间由层级变量 $X(t)$ 和相位变量 $\varphi(t)$ 构成，是一个二维状态空间。在许多拟生灭过程的应用中，相位变量 $\varphi(t)$ 用于描述驱动某个系统演化的底层环境信息。

拟生灭过程是一种能够以自然、直观的方式表示医疗保健系统的模型（见图 1），因此其在这一领域的应用潜力巨大，Heydar 等人 [6] 和 Grant [5] 的研究便证明了这一点。另一个在现实系统中的应用实例是，拟生灭过程已被用于分析基因家族的演化，例如 Diao 等人 [3] 的研究。

G´omez-Corral 和 L´opez-Garc´ıa 在 [4] 中对层依赖拟生灭过程（LD-QBD）进行了初步敏感性分析。本文在这些思路的基础上，将分析扩展到广泛的相关指标，并特别关注其在医疗保健系统建模中的应用。

假设层依赖拟生灭过程的生成元 $\mathrm{Q}(\boldsymbol{\theta})$ 依赖于记录在行向量 $\boldsymbol{\theta} = [\theta_i]_{i=1,\ldots,k}$ 中的一些参数。对 LD-QBD 的分析中涉及的各种稳态（长期）和瞬态（随时间变化）量，记为矩阵 $\mathrm{A}(\boldsymbol{\theta}) = [A_{ij}(\boldsymbol{\theta})],$ ，均可表示为涉及 $\mathrm{Q}(\boldsymbol{\theta})$ 的表达式，因此也依赖于 $\boldsymbol{\theta}$。

我们推导相关量的敏感性分析。给定参数向量 $\boldsymbol{\theta} = [\theta_i]_{i=1,\ldots,k}$ 和矩阵 $\mathrm{A}(\boldsymbol{\theta})$，我们写作

$$\frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \left[\begin{array}{ccc} \frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1} & \cdots & \frac{\partial \mathbf{A}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_k} \end{array} \right].$$

本文重点介绍该方法关键构件的开发。有关这项工作的完整细节，包括数值示例，将在我们未来的论文中呈现。

2 LD-QBD 模型

假设 $\{(X(t)\ \varphi(t)) :\ t \geq 0\}$ 是一个连续时间马尔可夫链，其状态为二维状态 $(X(t)\ \varphi(t))$，由层变量 $X(t)$ 和相位变量 $\varphi(t)$ 组成，取值于一个

[*]Anna Aksamit 获得澳大利亚研究理事会早期职业研究者奖 DE200100896 的资助。

[†]悉尼大学数学与统计学院，新南威尔士州 2006，澳大利亚，电子邮箱：anna.aksamit@sydney.edu.au

[‡]Ma lgorzata M. O'Reilly 获得澳大利亚研究理事会 Discovery 项目 DP180100352 的资助。[§]塔斯马尼亚大学数学学科，塔斯马尼亚州 7001，澳大利亚，电子邮箱：malgorzata.oreilly@utas.edu.au

[¶]Zbigniew Palmowski 获得波兰国家科学中心部分资助，资助项目编号为 2021/41/B/HS4/00599。

[‖]弗罗茨瓦夫科技大学纯数学与应用数学学院，波兰弗罗茨瓦夫 50-370，电子邮箱：zbigniew.palmowski@pwr.edu.pl

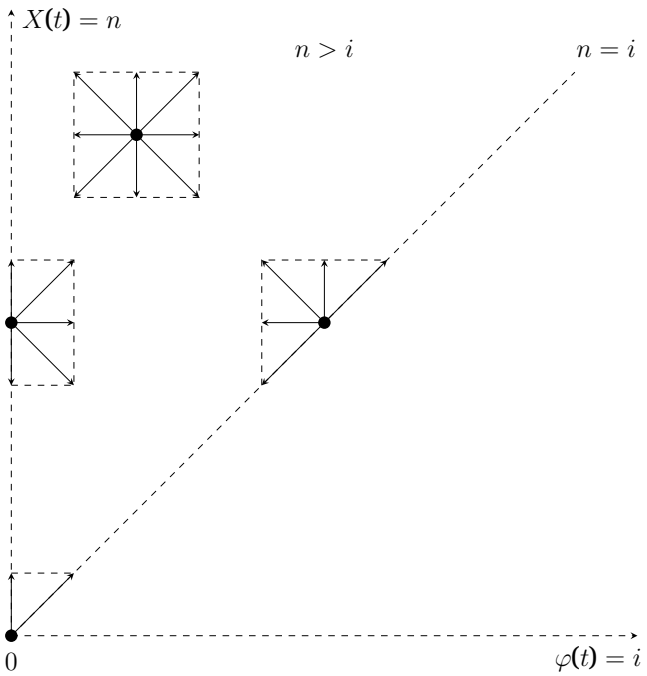

图 1：拟生灭过程的演化 $\{(\varphi(t)\ X(t)):\ t \geq 0\}$ 用于对患者总数进行建模 $X(t)$，以及系统的部分信息 $\varphi(t)$，例如（此处）某一特定类别的患者数量，如复杂患者；这类患者的治疗可能需要更多资源和时间 [5]。

不可约状态空间，该空间由下式给出

$$\mathcal{S} = \{(n, i) : n = 0, 1, 2, \ldots, N; i = 0, 1, \ldots, m_n\},$$

其转移率记录在生成矩阵 $\mathbf{Q} = [q_{(n,i)(n',i')}]_{(n,k),\ (n',i')\in\mathcal{S}}$ 中，该生成矩阵由分块矩阵 $\mathbf{Q}^{[n,n']} = [q_{(n,i)(n',i')}]_{i=0,\ 1,\ \ldots,\ m_n,\ i'=0,\ 1,\ \ldots,\ m_{n'}}$ 组成，使得

$$\begin{aligned}\mathbf{Q} &= [\mathbf{Q}^{[n,n']}]_{n,n'=0,1,\ldots,N} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{Q}^{[0,0]} & \mathbf{Q}^{[0,1]} & \mathbf{0} & \cdots & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{Q}^{[1,0]} & \mathbf{Q}^{[1,1]} & \mathbf{Q}^{[1,2]} & \cdots & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{Q}^{[N,N-1]} & \mathbf{Q}^{[N,N]} \end{bmatrix},\end{aligned}$$

因此，只可能转移到相邻层级。我们将此类过程称为连续时间层依赖拟生灭过程（LD-QBD），其上界为层级 N。层变量 $X(t)$ 可用于记录系统在时刻 t 的个体数量，而$\varphi(t)$可用于记录系统在时刻 t 的一些附加信息。

由于 LD-QBD 是连续时间马尔可夫链，因此马尔可夫链理论中的标准表达式均适用。然而，其状态空间 $\mathcal{S}$ 可能非常庞大，因此我们采用矩阵解析方法理论中的思路，从而得到高效的计算方法。我们还考虑没有上边界 N 的 LD-QBD。

我们注意到，利用矩阵解析方法文献中已有的方法，可以轻松推导出如此定义的 LD-QBD 的一系列瞬态和稳态性能指标，参见 Ramaswami [11], Joyner 和 Fralix [8], 以及 Phung-Duc等人 [10]。由于这些性能指标取决于模型参数，我们关注这些指标的敏感性分析。

3 感兴趣的量

我们在分析 LD-QBD 时考虑以下关键量 s,

- 状态长期占用比例（n, i）；
- 从状态（n, i）出发，在过程的样本路径中，首次到达第 $n \pm k$ 层并处于状态（$n \pm k, j$）时，在某个集合 $\mathcal{A} \subset \{0, 1, \ldots, N\}$ 所包含各层内的停留时间分布；
- 从状态（n_0, i）出发时刻 t 观察到的过程分布。

我们采用Grant [5], 总结的方法，该方法建立在Ramaswami [11], 、Joyner和Fralix [8], 以及Phung-Duc等人 [10]的研究结果之上。我们还给出各种量的相关拉普拉斯–斯蒂尔切斯变换（LST）的表达式。可以使用Abate和Whitt [1], 、Den Iseger [2], 或Horv´ath等人 [7], 的数值反演技术对这些变换进行反演，从而计算相应的量。

3.1 平稳分布

对于所有 $n = 0, 1, \ldots, N$, $i = 0, 1, \ldots, m_n$，定义极限概率

$$\pi_{(n,i)} = \lim_{t\to\infty} \mathbb{P}\left(X(t) = n, \varphi(t) = i\right)$$

记录在状态 (n, i) 中度过的长期时间比例，并将其收集为行向量$\boldsymbol{\pi} = [\boldsymbol{\pi}_n]_{n=0,\ 1,\ldots,N}$，其中 $\boldsymbol{\pi}_n = [\pi_{(n,i)}]_{i=0,\ 1,\ldots,I_n}$。

为了计算 $\boldsymbol{\pi}$，我们遵循 Grant [5], 中的方法，并将 $\boldsymbol{\pi}_n$ 的表达式写成关于 $\boldsymbol{\pi}_N$ 的形式（而不是关于 $\boldsymbol{\pi}_0$的形式，因为 $\boldsymbol{\pi}_0$ 中可能接近零的取值会导致计算错误）。我们考虑矩阵

$$\widehat{\mathbf{R}}^{(n)} = [\widehat{R}^{(n)}_{ij}]_{i=0,1,\ldots,m_{n-1},j=0,1,\ldots,m_n}$$

记录在过程从状态 $(n+1, i)$ 开始的条件下，在返回到层级 $n+1$ 之前，每单位在 $(n+1, i)$ 中度过的时间内，在状态 (n, j) 中度过的期望时间 $\widehat{R}^{(n)}_{ij}$。

对于 $n = 0$、1、.....、$N-1$，我们应用递推关系，

$$\begin{aligned}
\widehat{\mathbf{R}}^{(0)}(s) &= -\mathbf{Q}^{[1,0]}(\mathbf{Q}^{[0,0]} - s\mathbf{I})^{-1}, \\
\widehat{\mathbf{R}}^{(n)}(s) &= -\mathbf{Q}^{[n+1,n]}(\widehat{\mathbf{R}}^{(n-1)}(s)\mathbf{Q}^{[n-1,n]} + \mathbf{Q}^{[n,n]} - s\mathbf{I})^{-1},
\end{aligned}$$

然后，令 $\widehat{\ }\mathbf{R}^{(n)} = \widehat{\ }\mathbf{R}^{(n)}(0)$ 为，

$$\boldsymbol{\pi}_n = \boldsymbol{\pi}_{n+1}\widehat{\mathbf{R}}^{(n)} = \boldsymbol{\pi}_N \prod_{k=N-1}^{n} \widehat{\mathbf{R}}^{(k)},$$

其中 $\boldsymbol{\pi}_N$ 是以下方程组的解，

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\pi}_N \left(\widehat{\mathbf{R}}^{(N-1)}\mathbf{Q}^{[N-1,N]} + \mathbf{Q}^{[N,N]}\right) &= \mathbf{0}, \\
\boldsymbol{\pi}_N \left(\mathbf{1} + \sum_{n=0}^{N-1} \prod_{k=N-1}^{n} \widehat{\mathbf{R}}^{(k)}\mathbf{1}\right) &= 1.
\end{aligned}$$

备注1 类似的方法可用于推导 $\boldsymbol{\pi}$ 适用于层变量$X(t) \geq 0$ 没有上边界 N的 LD-QBD。首先，按照Phung-Duc等人 *[10],* 的做法，找到足够大的截断层级 L ，使条件 $||\widehat{\ }\mathbf{R}^{(n)}_L - \widehat{\ }\mathbf{R}^{(n)}_{L-1}|| < \epsilon$ 满足所需的判据 $\epsilon > 0$，其中 $\widehat{\ }\mathbf{R}^{(n)}_L$ 和 $\widehat{\ }\mathbf{R}^{(n)}_{L-1}$ 分别表示针对具有上边界 $N = L$ 和$N = L - 1$的 LD-QBD 计算得到的矩阵 $\widehat{\ }\mathbf{R}^{(n)}$。接着，应用近似 $\widehat{\ }\mathbf{R}^{(n)} \approx \widehat{\ }\mathbf{R}^{(n)}_L$。此技术也可用于其余量。

3.2 指定集合中的逗留时间

令 $\mathcal{A} \subset \{0, 1, \ldots, N\}$ 为某个理想水平或非理想水平集合，例如 $\mathcal{A} = \{0, \ldots, A\}$ 或 $\mathcal{A} = \{B, \ldots, N\}$，其中 A 和 B 为某些理想阈值或非理想阈值。

令 $\theta_n = \inf\{t > 0 : X(t) = n\}$ 和 $I(\cdot)$ 为示性函数。对于任意 $n' \neq n$，令

$$\mathbf{W}^{n,n'}(s) = [W_{ij}^{n,n'}(s)]_{i=1,\ldots,m_n; j=1,\ldots,m_{n'}}$$

为一个矩阵，使得其元素

$$\begin{aligned} W_{ij}^{n,n'}(s) &= \mathbb{E}(e^{-s\theta_{n'}} \times I\left(\varphi(\theta_{n'} \leq t, \theta_{n'} = j)\right. \\ &\quad \left. \mid X(0) = n, \varphi(0) = i)\right) \end{aligned}$$

是在从相位 i 的层 n 出发的条件下，过程首次访问层 n' 且以相位 j 到达所需时间的拉普拉斯–斯蒂尔切斯变换（LST）。

令 $\mathbf{W}_{\mathcal{A}}^{n,n'}(s) = [W_{\mathcal{A}\,ij}^{n,n'}(s)]_{i=1,\ldots,m_n;\ j=1,\ldots,m_{n'}}$ 为与 $W^{n,n'}_{ij}$ 相对应的样本路径中，在集合 $\mathcal{A}$ 内所花费总时间的拉普拉斯 – 斯蒂尔切斯变换矩阵。

记 $\mathbf{W}^{n,n'}(s)$ 以及 $\mathbf{G}_{\mathcal{A}}^{n,n'}(s) = \mathbf{W}^{n,n'}(s)$，当 $n' < n$ 时；并记 $\mathbf{H}^{n,n'}(s) = \mathbf{W}^{n,n'}(s)$ 以及 $\mathbf{H}_{\mathcal{A}}^{n,n'}(s) = \mathbf{W}_{\mathcal{A}}^{n,n'}(s)$，当 $n' > n$ 时。

注意，当 $\mathcal{A} = \{n'+1, \ldots, N\}$ 时，显然有 $\mathbf{G}_{\mathcal{A}}^{n,n'}(s) = \mathbf{G}^{n,n'}(s)$。当 $\mathcal{A} = \{0, \ldots, n'-1\}$ 时，则有 $\mathbf{H}_{\mathcal{A}}^{n,n'}(s) = \mathbf{H}^{n,n'}(s)$。

根据样本路径 [5, 8, 10–12], 的标准分解，我们有：

$$\mathbf{G}_{\mathcal{A}}^{n,n-k}(s) = \mathbf{G}_{\mathcal{A}}^{n,n-1}(s) \times \cdots \times \mathbf{G}_{\mathcal{A}}^{n-k+1,n-k}(s),$$

其中

$$\mathbf{G}_{\mathcal{A}}^{N,N-1}(s) = -(\mathbf{Q}^{[N,N]} - s\mathbf{I} \times I(N \in \mathcal{A}))^{-1}\mathbf{Q}^{[N,N-1]},$$

对于 $n = N-1, \ldots, 1$,

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{\mathcal{A}}^{n,n-1}(s) &= -\Big(\mathbf{Q}^{[n,n]} - s\mathbf{I} \times I(n \in \mathcal{A}) \\ &\quad + \mathbf{Q}^{[n,n+1]}\mathbf{G}_{\mathcal{A}}^{n+1,n}(s)\Big)^{-1}\mathbf{Q}^{[n,n-1]}. \end{aligned}$$

类似地,

$$\mathbf{H}_{\mathcal{A}}^{n,n+k}(s) = \mathbf{H}_{\mathcal{A}}^{n+1,n+2}(s) \times \cdots \times \mathbf{H}_{\mathcal{A}}^{n+k-1,n+k}(s),$$

其中

$$\mathbf{H}_{\mathcal{A}}^{0,1}(s) = -(\mathbf{Q}^{[0,0]} - s\mathbf{I} \times I(0 \in \mathcal{A}))^{-1}\mathbf{Q}^{[0,1]},$$

对于 $n = N-1$, ..., 1,

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\mathcal{A}}^{n,n+1}(s) &= -\Big(\mathbf{Q}^{[n,n]} - s\mathbf{I} \times I(n \in \mathcal{A}) \\ &\quad + \mathbf{Q}^{[n,n-1]}\mathbf{H}^{n-1,n}(s)\Big)^{-1}\mathbf{Q}^{[n,n+1]}. \end{aligned}$$

3.3 时刻 t 的分布

假设拟生灭过程从某一层级 n_0 的某个相位 $i_0 = 0$ 开始，1，……，m_{n_0}，其初始相位分布为 $\boldsymbol{\alpha} = [\alpha_j]_{j\in 0,\ 1,\ \ldots\ldots m_{n_0}}$，满足 $\alpha_j = \mathbb{P}(\varphi(0) = j)$。

定义向量 $\mathbf{f}(t) = [\mathbf{f}_n(t)]_{n=0,\ 1,\ \ldots,\ N}$ 使得

$$[\mathbf{f}_n(t)]_j \quad = \quad \mathbb{P}_{\boldsymbol{\alpha}}(X_t = n, \varphi(t) = j)$$

表示在给定 $\boldsymbol{\alpha}$ 的条件下，t 时刻过程处于层级 n 且处于相位 j 的概率；相应的~~拉普拉斯变换~~向量 $\mathbf{f}(s) = [\mathbf{f}_n(s)]_{n=0,\ 1,\ \ldots,\ N}$ 使得

$$[\widetilde{\mathbf{f}}_n(s)]_j \quad = \quad \int_{t=0}^{\infty} e^{-st}\mathbb{P}_{\boldsymbol{\alpha}}(X_t = n, \varphi(t) = j)dt.$$

该过程的柯尔莫哥洛夫微分方程为:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{f}_0(t)}{\partial t} &= \mathbf{f}_0(t)\mathbf{Q}^{[0,0]} + \mathbf{f}_1(t)\mathbf{Q}^{[1,0]}, \\
\frac{\partial \mathbf{f}_n(t)}{\partial t} &= \mathbf{f}_n(t)\mathbf{Q}^{[n,n]} + \mathbf{f}_{n-1}(t)\mathbf{Q}^{[n-1,n]} + \mathbf{f}_{n+1}(t)\mathbf{Q}^{[n+1,n]}, \\
&\qquad \text{for } n = 1, \ldots, N-1, \\
\frac{\partial \mathbf{f}_N(t)}{\partial t} &= \mathbf{f}_N(t)\mathbf{Q}^{[N,N]} + \mathbf{f}_{N-1}(t)\mathbf{Q}^{[N-1,N]},
\end{aligned}$$

初始条件为 $\mathbf{f}_n(0) = \boldsymbol{\alpha} I(n = n_0)$。

为了求值 ~~$\widetilde{}$~~对于 s，我们应用 Grant [5], 中总结的以下递推关系

$$\begin{aligned}
\widetilde{\mathbf{f}}_{n_0}(s) &= -\boldsymbol{\alpha}\Big((\mathbf{Q}^{[n_0,n_0]} - s\mathbf{I}) + \widehat{\mathbf{R}}^{(n_0-1)}(s)\mathbf{Q}^{[n_0-1,n_0]} \\
&\qquad + \widetilde{\mathbf{R}}^{(n_0+1)}(s)\mathbf{Q}^{[n_0+1,n_0]}\Big)^{-1},
\end{aligned}$$

然后对于 $n > n_0$,

$$\begin{aligned}
\widetilde{\mathbf{f}}_n(s) &= -\boldsymbol{\alpha}\mathbf{H}^{n_0,n}(s)\Big((\mathbf{Q}^{[n,n]} - s\mathbf{I}) + \widehat{\mathbf{R}}^{(n-1)}(s)\mathbf{Q}^{[n-1,n]} \\
&\qquad + \widetilde{\mathbf{R}}^{(n+1)}(s)\mathbf{Q}^{[n+1,n]}\Big)^{-1},
\end{aligned}$$

对于 $n < n_0$,

$$\begin{aligned}
\widetilde{\mathbf{f}}_n(s) &= -\boldsymbol{\alpha}\mathbf{G}^{n_0,n}(s)\Big((\mathbf{Q}^{[n,n]} - s\mathbf{I}) + \widehat{\mathbf{R}}^{(n-1)}(s)\mathbf{Q}^{[n-1,n]} \\
&\qquad + \widetilde{\mathbf{R}}^{(n+1)}(s)\mathbf{Q}^{[n+1,n]}\Big)^{-1},
\end{aligned}$$

其中，对于 $n = N$、……、1，我们应用递推关系,

$$\begin{aligned}
\widetilde{R}_N(\mathbf{0}) &= -\mathbf{Q}^{[N-1,N]}(\mathbf{Q}^{[N,N]} - s\mathbf{I})^{-1}, \\
\widetilde{\mathbf{R}}^{(n)}(s) &= -\mathbf{Q}^{[n-1,n]}(\mathbf{Q}^{[n,n]} - s\mathbf{I} + \widetilde{\mathbf{R}}^{(n+1)}(s)\mathbf{Q}^{[n+1,n]})^{-1}.
\end{aligned}$$

4 敏感性分析

首先，我们通过简单的例子来阐明这一理论。

例1 假设 $X(t)$ 表示时刻 t 系统中的顾客总数。令$\varphi(t) \in \{1,\ldots,k\}$ 为驱动系统演化的环境相位，因此$\lambda_{\varphi(t)} > 0$ 是系统的到达率（条件是 $X(t) < N$），而 $\mu_{\varphi(t)} > 0$ 是每位顾客的服务率（条件是 $X(t) > 0$）。假设 $\{\varphi(t) : t \geq 0\}$ 是生成元为 $\mathrm{T} = [T_{ij}]$的连续时间马尔可夫链。该系统可建模为生成元为 $\mathrm{Q}(\boldsymbol{\theta}) = [q(\boldsymbol{\theta})_{(n,i)(m,j)}]$的 LD-QBD，其取决于参数向量 $\boldsymbol{\theta} = [\lambda_1,\ldots,\lambda_k,\mu_1,\ldots,\mu_k]$，其中非零非对角元素$q(\boldsymbol{\theta})^{(n,i)(m,j)}$ 为

$$\begin{cases} T_{ij} & j \neq i, m = n; \\ \lambda_i & j = i, m = n+1, n < N; \\ n\mu_i & j = i, m = n-1, n > 0. \end{cases}$$

那么 $\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}}\mathrm{Q}(\boldsymbol{\theta})$ 可表示为

$$\frac{\partial q(\boldsymbol{\theta})_{(n,i)(m,j)}}{\partial \lambda_i} = \begin{cases} 1 & j = i, m = n+1, n < N; \\ -1 & j = i, m = n, 0 \leq n < N; \\ 0 & otherwise; \end{cases}$$

and

$$\frac{\partial q(\boldsymbol{\theta})_{(n,i)(m,j)}}{\partial \mu_i} = \begin{cases} n & j = i, m = n-1, n > 0; \\ -n & j = i, m = n, 0 < n \leq N; \\ 0 & otherwise. \end{cases}$$

例2 假设类型为 $k \in \{1,2\}$ 的顾客以总速率 $\lambda_k > 0$ 到达容量为 N 的系统，每位顾客的服务速率为 $\mu_k > 0$ 。该系统可建模为 LD-QBD$\{(X(t)\ \varphi(t)) : t \geq 0\}$ 其中， $X(t)$ 记录顾客总数，而 $\varphi(t) \leq X(t)$ 记录时刻 t 系统中类型 1 的顾客数。生成元 $\mathrm{Q}(\boldsymbol{\theta}) = [q(\boldsymbol{\theta})_{(n,i)(m,j)}]$ 取决于参数向量 $\boldsymbol{\theta} = [\lambda_1,\lambda_2,\mu_1,\mu_2]$，其非零非对角元素 $q(\boldsymbol{\theta})^{(n,i)(m,j)}$ 为

$$\begin{cases} \lambda_1 & j = i, m = n+1, n < N; \\ \lambda_2 & j = i+1, m = n+1, n < N; \\ (n-i)\mu_1 & j = i, m = n-1, n > 0; \\ i\mu_2 & j = i-1, m = n-1, n > 0. \end{cases}$$

那么 $\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}}\mathrm{Q}(\boldsymbol{\theta})$ 为

$$\frac{\partial q(\boldsymbol{\theta})_{(n,i)(m,j)}}{\partial \lambda_1} = \begin{cases} 1 & j = i, m = n+1, n < N; \\ -1 & j = i, m = n, 0 \leq n < N; \\ 0 & otherwise; \end{cases}$$

and

$$\frac{\partial q(\boldsymbol{\theta})_{(n,i)(m,j)}}{\partial \lambda_2} = \begin{cases} 1 & j = i+1, m = n+1, n < N; \\ -1 & j = i, m = n, 0 \leq n < N; \\ 0 & otherwise; \end{cases}$$

and

$$\frac{\partial q(\boldsymbol{\theta})_{(n,i)(m,j)}}{\partial \mu_1} = \begin{cases} (n-i) & j=i, m=n-1, n>0; \\ -(n-i)\mu_1 & j=i, m=n, 0<n\leq N; \\ 0 & otherwise; \end{cases}$$

and

$$\frac{\partial q(\boldsymbol{\theta})_{(n,i)(m,j)}}{\partial \mu_2} = \begin{cases} i & j=i-1, m=n-1, n>0; \\ -i & j=i, m=n, 0<n\leq N; \\ 0 & otherwise. \end{cases}$$

例 3 假设 LD-QBD 的生成元是 $\boldsymbol{\epsilon} = [\epsilon_i]_{i=1,\ldots,k} > \mathbf{0}$ 的函数，使得

$$\mathbf{Q}(\boldsymbol{\epsilon}) = \mathbf{Q} + \sum_{i=1}^{k} \epsilon_i \times \widetilde{\mathbf{Q}}_i$$

当 $||\boldsymbol{\epsilon}|| > \mathbf{0}$ 足够小时，它是一个生成元。于是

$$\frac{\partial \mathbf{Q}(\boldsymbol{\epsilon})}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} = \left[\begin{array}{ccc} \frac{\partial \mathbf{Q}(\boldsymbol{\epsilon})}{\partial \epsilon_1} & \cdots & \frac{\partial \mathbf{Q}(\boldsymbol{\epsilon})}{\partial \epsilon_k} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{ccc} \widetilde{\mathbf{Q}}_1 & \cdots & \widetilde{\mathbf{Q}}_k \end{array} \right].$$

这些及其他 LD-QBD 的相关量导数 $\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}}$ 可用矩阵微积分中的表达式表示为 $\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}}\mathbf{Q}(\boldsymbol{\theta})$，例如 [9], ，如下所示。

令 $\mathbf{G}^{n,n-k} = \mathbf{G}^{n,n-k}(0)$ 和 $\mathbb{E}^{n,n-k} = -\frac{\partial}{\partial s}\mathbf{G}^{n,n-k}(s)\big|_{s=0}$ 分别表示概率矩阵和期望矩阵。

令 $\mathbf{G}^{n,n-k}(\boldsymbol{\theta})$ 和 $\mathbb{E}^{n,n-k}(\boldsymbol{\theta})$ 表示在给定 $\boldsymbol{\theta}$ 时 $\mathbf{G}^{n,n-k}$ 和 $\mathbb{E}^{n,n-k}$ 的记号。根据第3.2节中的递归表达式，我们有:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}}\mathbf{G}^{N,N-1}(\boldsymbol{\theta}) \\ &= (\mathbf{Q}^{[N,N]}(\boldsymbol{\theta}))^{-1} \times \frac{\partial \mathbf{Q}^{[N,N]}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \times \left(\mathbf{I}_k \otimes (\mathbf{Q}^{[N,N]}(\boldsymbol{\theta}))^{-1}\right) \\ &\quad \times \left(\mathbf{I}_k \otimes \mathbf{Q}^{[N,N-1]}(\boldsymbol{\theta})\right) \\ &\quad -(\mathbf{Q}^{[N,N]}(\boldsymbol{\theta}))^{-1} \times \frac{\partial \mathbf{Q}^{[N,N-1]}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}}; \end{aligned}$$

对于 $n = N-1, \ldots, 1$，我们有递推关系

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}}\mathbf{G}^{n,n-1}(\boldsymbol{\theta}) \\ &= -\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}}\left(\mathbf{Q}^{[n,n]}(\boldsymbol{\theta}) + \mathbf{Q}^{[n,n+1]}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{G}^{n+1,n}(\boldsymbol{\theta})\right)^{-1} \\ &\quad \times \left(\mathbf{I}_k \otimes \mathbf{Q}^{[n,n-1]}(\boldsymbol{\theta})\right) \\ &\quad -(\mathbf{Q}^{[n,n]}(\boldsymbol{\theta}) + \mathbf{Q}^{[n,n+1]}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{G}^{n+1,n}(\boldsymbol{\theta}))^{-1} \\ &\quad \times \frac{\partial \mathbf{Q}^{[n,n-1]}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \end{aligned}$$

with

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\left(\mathbf{Q}^{[n,n]}(\boldsymbol{\theta})+\mathbf{Q}^{[n,n+1]}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{G}^{n+1,n}(\boldsymbol{\theta})\right)^{-1}\\
&= \left(\mathbf{Q}^{[n,n]}(\boldsymbol{\theta})+\mathbf{Q}^{[n,n+1]}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{G}^{n+1,n}(\boldsymbol{\theta})\right)^{-1}\\
&\quad\times\Big(\frac{\partial(\mathbf{Q}^{[n,n]}(\boldsymbol{\theta})}{\partial\boldsymbol{\theta}}+\frac{\partial\mathbf{Q}^{[n,n+1]}(\boldsymbol{\theta})}{\partial\boldsymbol{\theta}}\times\left(\mathbf{I}_k\otimes\mathbf{G}^{n+1,n}(\boldsymbol{\theta})\right)\\
&\quad+\mathbf{Q}^{[n,n+1]}(\boldsymbol{\theta})\times\frac{\partial\mathbf{G}^{n+1,n}(\boldsymbol{\theta})}{\partial\boldsymbol{\theta}}\Big)\\
&\quad\times\left(\mathbf{I}_k\otimes((\mathbf{Q}^{[n,n]}(\boldsymbol{\theta})+\mathbf{Q}^{[n,n+1]}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{G}^{n+1,n}(\boldsymbol{\theta}))^{-1}\right);
\end{aligned}$$

因此，对于 $k\geq 2$，我们得到递推关系，

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\mathbf{G}^{n,n-k}(\boldsymbol{\theta})\\
&= \frac{\partial\mathbf{G}^{n,n-k+1}(\boldsymbol{\theta})}{\partial\boldsymbol{\theta}}\times\left(\mathbf{I}_k\otimes\mathbf{G}^{n-k+1,n-k}(\boldsymbol{\theta})\right)\\
&\quad+\mathbf{G}^{n,n-k+1}(\boldsymbol{\theta})\times\frac{\partial\mathbf{G}^{n-k+1,n-k}(\boldsymbol{\theta})}{\partial\boldsymbol{\theta}}.
\end{aligned}$$

我们采用类似的方法来计算 $\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\mathbb{E}^{n,\,n-k}(\boldsymbol{\theta})$ 以及高阶矩的导数。 $\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\mathbf{H}^{n,\,n+k}(\boldsymbol{\theta})$ 和相关量的表达式可由对称性得到。

接下来，为了计算 $\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\mathbf{f}(t;\,\boldsymbol{\theta})$，我们应用

$$\int_0^\infty e^{-st}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\mathbf{f}(t;\boldsymbol{\theta})dt \;=\; \frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\int_0^\infty e^{-st}\mathbf{f}(t;\boldsymbol{\theta})dt=\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\widetilde{\mathbf{f}}(s),$$

因为这样就可以利用前文各节的结果计算右侧，然后将其求逆，从而得到我们关心的量 $\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\mathbf{f}_n(t;\,\boldsymbol{\theta})$，对于所有 n 均如此。

根据第 3.3 节中的递归表达式，我们有：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\widetilde{\mathbf{f}}_{n_0}(s)}{\partial\boldsymbol{\theta}} &= -\widetilde{\mathbf{f}}_{n_0}(s)\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\Big((\mathbf{Q}^{[n_0,n_0]}-s\mathbf{I})\\
&\quad+\widehat{\mathbf{R}}^{(n_0-1)}(s)\mathbf{Q}^{[n_0-1,n_0]}+\widetilde{\mathbf{R}}^{(n_0+1)}(s)\mathbf{Q}^{[n_0+1,n_0]}\Big)\\
&\quad\times\Big(\mathbf{I}_k\otimes\Big((\mathbf{Q}^{[n_0,n_0]}-s\mathbf{I})\\
&\quad+\widehat{\mathbf{R}}^{(n_0-1)}(s)\mathbf{Q}^{[n_0-1,n_0]}+\widetilde{\mathbf{R}}^{(n_0+1)}(s)\mathbf{Q}^{[n_0+1,n_0]}\Big)\Big)^{-1};
\end{aligned}$$

对于 $n\neq n_0$,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\widetilde{\mathbf{f}}_n(s;\boldsymbol{\theta})}{\partial\boldsymbol{\theta}} &= \Big(-\boldsymbol{\alpha}\frac{\partial\mathbf{W}^{n_0,n}(s;\boldsymbol{\theta})}{\partial\boldsymbol{\theta}}\\
&\quad-\widetilde{\mathbf{f}}_n(s;\boldsymbol{\theta})\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\Big((\mathbf{Q}^{[n,n]}(\boldsymbol{\theta})-s\mathbf{I})\\
&\quad+\widehat{\mathbf{R}}^{(n-1)}(s;\boldsymbol{\theta})\mathbf{Q}^{[n-1,n]}(\boldsymbol{\theta})+\widetilde{\mathbf{R}}^{(n+1)}(s;\boldsymbol{\theta})\mathbf{Q}^{[n+1,n]}(\boldsymbol{\theta})\Big)\\
&\quad\times\Big(\mathbf{I}_k\otimes\Big((\mathbf{Q}^{[n,n]}(\boldsymbol{\theta})-s\mathbf{I})\\
&\quad+\widehat{\mathbf{R}}^{(n-1)}(s;\boldsymbol{\theta})\mathbf{Q}^{[n-1,n]}(\boldsymbol{\theta})+\widetilde{\mathbf{R}}^{(n+1)}(s;\boldsymbol{\theta})\mathbf{Q}^{[n+1,n]}(\boldsymbol{\theta})\Big)^{-1}\Big).
\end{aligned}$$

此外，根据第3.1节中的递归表达式，

$$\begin{aligned}\frac{\partial \boldsymbol{\pi}_n(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} &= \frac{\partial \boldsymbol{\pi}_{n+1}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \times \left(\mathbf{I}_k \otimes \widehat{\mathbf{R}}^{(n)}(\boldsymbol{\theta})\right) \\ &\quad + \boldsymbol{\pi}_{n+1}(\boldsymbol{\theta}) \times \frac{\partial \widehat{\mathbf{R}}^{(n)}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}},\end{aligned}$$

其中，

$$\begin{aligned}\frac{\partial \boldsymbol{\pi}_N(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} &= -\boldsymbol{\pi}_N(\boldsymbol{\theta}) \\ &\times \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}} \left(\widehat{\mathbf{R}}^{(N-1)}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{Q}^{[N-1,N]}(\boldsymbol{\theta}) + \mathbf{Q}^{[N,N]}(\boldsymbol{\theta})\right) \\ &\times \left(\mathbf{I}_k \otimes \left(\widehat{\mathbf{R}}^{(N-1)}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{Q}^{[N-1,N]}(\boldsymbol{\theta}) + \mathbf{Q}^{[N,N]}(\boldsymbol{\theta})\right)^{-1}\right).\end{aligned}$$

最后，这些量

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}} \widehat{\mathbf{R}}^{(n-1)}(s;\boldsymbol{\theta}) \quad \text{and} \quad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}} \widetilde{\mathbf{R}}^{(n+1)}(s;\boldsymbol{\theta})$$

上文右侧的这些量是完成分析所必需的，分别可用类似方法从第3.1节和第 3.3 节中 $\widehat{\mathbf{R}}^{(n-1)}(s;\boldsymbol{\theta})$ 和 $\widetilde{\mathbf{R}}^{(n-1)}(s;\boldsymbol{\theta})$ 的递归表达式推导得出。

参考文献

[1] J. Abate 和 W. Whitt. 概率分布拉普拉斯变换的数值反演. ORSA计算期刊, 7(1):36–43, 1995年.

[2] P. Den Iseger. 利用高斯求积进行数值变换反演. 工程与信息科学中的概率, 20(1):1–44, 2006年.

[3] J. Diao, T. L. Stark, D. A. Liberles, M. M. O'Reilly 和 B. R. Holland. 基因重复演化的层依赖型QBD模型. 《随机模型》, 36(2):285–311, 2020年.[4] A. G´omez-Corral 和 M. L´opez-Garc´ıa. 有限LD-QBD过程中的扰动分析及其在流行病模型中的应用. 数值线性代数及其应用, 25(5), 2018年.[5] A. Grant. 将医院升级级别建模为拟生灭过程. 荣誉学位论文，塔斯马尼亚大学，澳大利亚，2021年.

[6] M. Heydar, M. M. O'Reilly, E. Trainer, M. Fackrell, P. G. Taylor 和 A. Tirdad. 一种针对随机到达与离开的患者床位分配问题的随机模型. 运筹学年鉴, 2021年.[7] G. Horv´ath, I. Horv´ath, S. A.-D. Almousa 和 M. Telek. 利用集中矩阵指数分布进行拉普拉斯变换数值反演. 性能评估, 137:102067, 2020年.[8] J. Joyner 和 B. Fralix. 重新审视G/M/1型马尔可夫过程. 《随机模型》, 32(2):253–274, 2016年.[9] P. Kowal. 关于矩阵求导的注记. 慕尼黑个人RePEc档案, 论文编号3197, https://mpra.ub.uni-muenchen.de/3917/, 2007年。

[10] T. Phung-Duc, H. Masuyama, S. Kasahara 和 Y. Takahashi. 一种计算层依赖型拟生灭过程速率矩阵的简单算法. 载于第五届排队论与网络应用国际会议论文集，第46–52页，2010年.[11] V. Ramaswami. 矩阵解析方法：教程式综述及若干扩展与新结果. 载于 S. Chakravarthy 和 A. Alfa 编，《随机模型中的矩阵解析方法》，第261–296页。Marcel Dekker：纽约，1997年.[12] A. Samuelson, M. O’Reilly 和 N. Bean. 通过物理解释构造离散时间拟生灭过程算法. 《随机模型》，36(2):193–222, 2020年。