马尔科夫链稳态收敛速度与一步转移矩阵的关系

王雨婷，李宇洋

（1.西安电子科技大学 计算机科学与技术学院，陕西 西安 710071；
2.西安电子科技大学 计算机科学与技术学院，陕西 西安 710071）

摘要：在排队论中，离散时间马尔可夫链被广泛使用，其稳定状态的分布也是一个重要的研究特性。两个关键性的问题是研究稳定状态分布的存在，以及何因素影响系统收敛至稳定状态的速度。本文通过马氏链平稳状态定理讨论稳定状态存在的条件，进而通过一步转移矩阵探究影响收敛速率的因素。首先分析转移概率矩阵的特征向量，利用 Perron-Frobenius 定理进行合理的推论猜想，然后加以实验论证，进而得出结论。

关键词：马尔科夫链，一步转移，平稳分布

1 引言

1.1 马尔可夫链及一步转移概率矩阵的定义

马尔可夫过程指的是当随机某一时刻的状态已知时，大于这一时刻所处状态的概率特性只与该过程的状态相关。马尔科夫链即离散状态空间的马尔可夫过程。马尔可夫链时刻n从i到j的一步转移概率定义如下

$$\forall i, j \in S, P\left(X_{n+1}=j \mid X_n=i\right) \triangleq p_{ij}(n)$$

其中，X_n表示n时刻随机序列的状态。

记

$$\boldsymbol{P}(\mathbf{1})=\left(p_{ij}\right)_{i, j \in S}$$

则称$P(1)$为X的一步转移概率矩阵。k步转移概率矩阵记为$P(k)$。

1.2 一步转移概率矩阵和马尔科夫链的性质

对于一个马尔科夫链，如果任意两个状态都是互通的，也就是对于对于随机过程的任意一个状态可以转移到任一个另外状态，即

$$P(X_n=j|X_0=i)>0 \ for\ some\ n \geq 0\ \forall i,j$$

则称这个马尔科夫链是不可约的。

如果一个状态 $\boldsymbol{i}$ 可以在 $\boldsymbol{k}$ 步后回到本状态，其中 $\boldsymbol{k}$ 满足

$$k=GCD\{n: P(X_n=i|X_0=i)>0\}$$

如果所有的在马尔可夫链中状态都是状态为 1 的，那么我们称这个马尔科夫链是非周期的。

2 马尔可夫链稳定状态分布存在的条件

由马氏链平稳状态定理得，如果一个非周期马氏链具有转移概率矩阵P, 且它的任何两个状态是连通的，那么$\lim\limits_{n\to\infty} P_{ij}^n$存在且与$i$无关，记$\lim\limits_{n\to\infty} P_{ij}^n=\pi(j)$，我们有

1. $\lim_{n\to\infty} P^n = \begin{bmatrix} \pi(1) & \pi(2) & \cdots & \pi(j) & \cdots \\ \pi(1) & \pi(2) & \cdots & \pi(j) & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \pi(1) & \pi(2) & \cdots & \pi(j) & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}$，概率转移矩阵自乘足够多次后，每行值相等。由于对任意初始概率向量π_0，有$\pi_0 P_n$相等。当P_n行相等时，则显然为定值。（π_0分量之和为 1）

2. $\pi(j) = \sum_{i=0}^{\infty} \pi(i) P_{ij}$，这意味着当随机过程达到该平稳分布时，后续每一步的状态概率分布都不再随时间变化，各状态的概率趋于稳定。

3. π是方程$nP = \pi$的唯一非负解。其中，

$$\pi = [\pi(1), \pi(2), \cdots, \pi(j), \cdots], \quad \sum_{i=0}^{\infty} \pi_i = 1$$

π称为马氏链的平稳分布。

由定理得，有限、非周期、不可约的马氏链是平稳分布必定存在、唯一、与初始分布无关且保持不变的充分必要条件。

3 一步转移概率矩阵如何影响系统稳态收敛的快慢的猜想

3.1 一步转移矩阵一定有一个特征值为 1

考察$X = XP$，***P*** 为一步转移概率矩阵，此公式可以变形为

$$0 = (P - E)^T X^T$$

由于 X 为非 0 矩阵，则此齐次线性方程必须有非零解，即$(P-E)^T$必须满足

$$det((P-E)^T) = 0$$

即P^T的特征值为 1，由于转置后特征值相同，所以 1 是P的一个特征值。

3.2 一步转移矩阵的特征值一定小于 1

对于一个马尔可夫矩阵（一步转移概率矩阵）A，那么A^n仍然是一个马尔科夫矩阵，设函数$S(x) = \sum_{i=1}^{n} x_i$，$A^2$的行向量和为

$$S([A^2]_{col}) = S(\sum_{i=1}^{n} a_i a_{col\ i}) = \sum_{i=1}^{n} S(a_i) a_{col\ i} = \sum_{i} a_{col\ i} = 1$$，

同理，可以推出A^n也是马尔可夫矩阵，对于特征向量 x，$A^n x = \lambda^n x$，如果存在$|\lambda| > 1$,那么等式的值$\to \infty$，但是$A_{ij} \le 1$，所以等式不可能无穷大，与条件矛盾，所以假设不成立，也就说明一部转移矩阵的特征值绝对值一定小于等于 1。

3.3 一部转移矩阵左特征向量与右特征向量正交

假设 ***x*** 为 ***A*** 的右特征向量，对应右特征值λ有$Ax = \lambda x$，相似的，假设 ***y*** 是 ***A*** 的左特征向量，对应左特征值μ，且 $\mu \ne \lambda$，有

$$y^T A = \mu y^T \Leftrightarrow y^T A x = \lambda y^T x \Leftrightarrow \ y^T A x - \lambda y^T x = 0$$
$$\Leftrightarrow (\mu y^T - \lambda y^T) x = 0 \Leftrightarrow (\mu - \lambda) y^T x = 0$$

由于$\mu \ne \lambda$，有 ***y*** 与 ***x*** 正交。

3.4 根据 Perron-Frobenius 定理推测收敛速度

对于一个不可约，非周期的一步转移概率矩阵，若随机空间是有限的，那么对于所有的左特征向量和右特征向量的集合

$$U=(u1,u2,\ldots,u+m),V=(v1,v2,\ldots,v_m),$$

我们可以得$U_i^TV_i=1$。

此外，构造一个对角阵$\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n\end{bmatrix}=\Lambda$，由于$V$是由右特征向量的集合，$AV=VA$，而又因为$U_i^TV_i=1$，可以得出

$$U^TAV=U^TV\Lambda=\Lambda\Leftrightarrow\sum_{i=1}^{m}\lambda_i\nu u_i^T$$

之后我们可以得到

$$A^n=V\Lambda^nU^T\Leftrightarrow\sum_{i=1}^{m}\lambda_i^n v_i u_i^T$$

对其进行简单的变化，得出

$$|A^n-\lambda_1^n v_1 u_1^T|=|\sum_{i=2}^{m}\lambda_i^n v_1 u_1^T|\le\sum_{i=2}^{m}|\lambda_i^n||v_1||u_1^T|$$

我们可以对λ进行排列，让$\lambda1>|\lambda2|\geqslant\ldots\geqslant|\lambda m|$，但是注意当两个$\lambda$绝对值相同的时候要把代数重数大的放在排列的前面。

根据 P-F 定理，我们可以得到

$$A_n=\lambda_1^n v_1 u_1^T+O(n^{r_2-1}|\lambda_2^n|)$$

由于右特征向量和左特征向量正交，上式可变形为

$$P^n=1\pi^T+O(n^{r_2-1}|\lambda_2|^n)$$

其中r_2是特征值序列中第二个特征值的代数重数。

由此，我们可以猜测马尔科夫链收敛的速度和特征值序列中第二个特征值绝对值相关，如果特征值都是离散的（代数重数均为 1），那么第二个特征值的越小，马尔科夫链收敛越快。

4 对于一步转移概率矩阵如何影响系统稳态收敛的快慢的模拟

4.1 创建一个马尔可夫矩阵并检测其是否收敛

```
rng(1); % For reproducibility
numStates = 23;
Zeros1 = 250;
mc1 = mcmix(numStates,'Zeros',Zeros1);
figure;
```

6. graphplot(mc1,'ColorNodes',true);

7. tf1 = isergodic(mc1) ***%tf1=1 indicates the chain is ergotic***

8. figure;

9. eigplot(mc1);

output:tf1=1

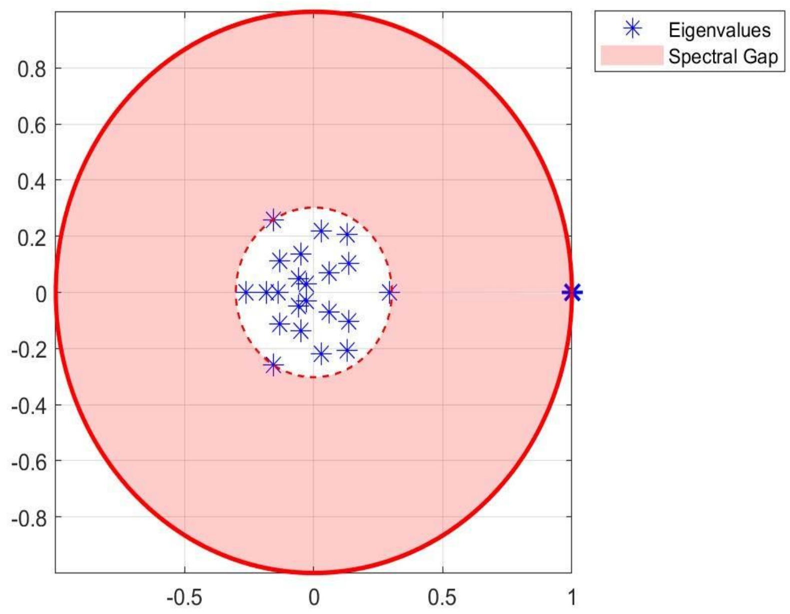

Fig1 生成的马尔科夫矩阵的特征值分布，其中第二大的特征值为虚线圆的边界上

4.2 检验特征值的几何重数并预估收敛时间

1. [evalues, repeats]=eigval((mc1.P))

2. stem(evalues,repeats)

3. [~,tMix1] = asymptotics(mc1)

output: tmix1=0.8357steps

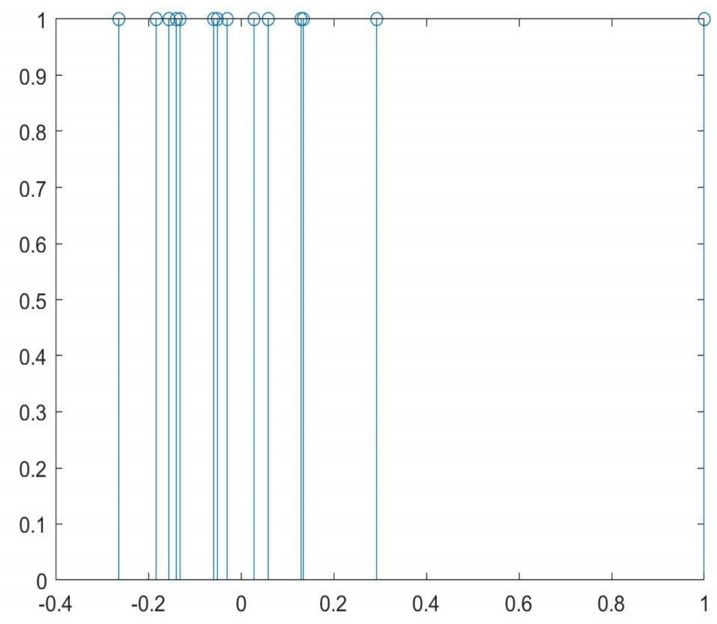

Fig2 生成的特征值的分布，可以看出没有代数重数超过 1 的特征值

4.3 创建另一个马尔可夫矩阵并检测其收敛性

1. Zeros2 = 475;
2. mc2 = mcmix(numStates,'Zeros',Zeros2);
3. figure;
4. graphplot(mc2,'ColorNodes',true);
5. tf2 = isergodic(mc2)

output: tf2=0t

%tf2 = 0 indicates that mc2 is not ergodic

%Extract the recurrent subchain from mc2. Determine whether the subchain is ergodic.

6. [bins,~,ClassRecurrence] = classify(mc2);
7. recurrentClass = find(ClassRecurrence,1);
8. recurrentState = find((bins == recurrentClass),1);

9. sc2 = subchain(mc2,recurrentState);

10. tf2 = isergodic(sc2)

output: tf2=1

%note that tf2 is now ergodic

4.4 检验特征值分布及其几何重数并预估收敛时间

1. figure;

2. eigplot(sc2);

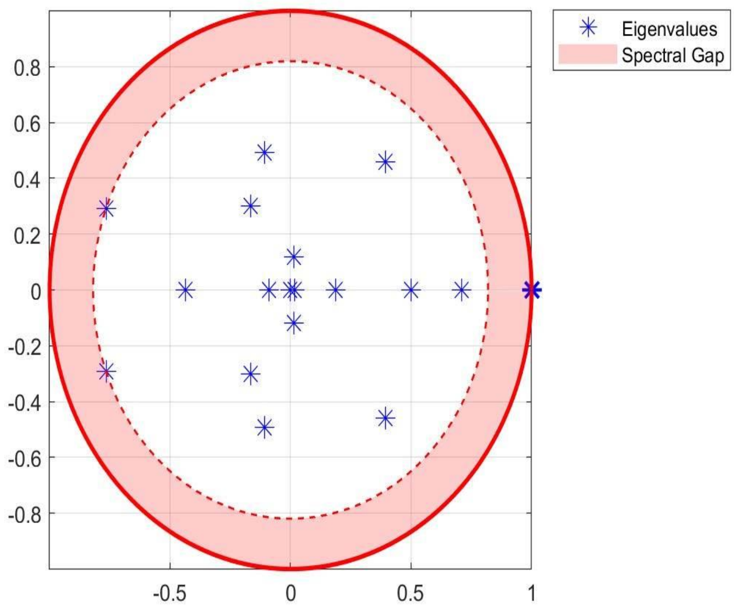

Fig3 新生成的马尔科夫矩阵的特征值分布，其中第二大的特征值为虚线圆的边界上

可以看出这次特征值序列中第二特征值的大小较大，根据假设，可以得出其收敛时间应当较长。

%plot the eignvalues and its occurences

1. [evalues, repeats]=eigval((mc2.P))

2. stem(evalues,repeats)

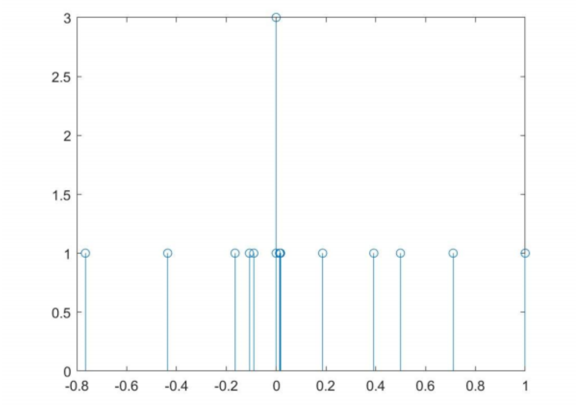

Fig4 特征值和其几何重数，可以看出第二特征值几何重数仍然是 1

1. [~,tMix2] = asymptotics(sc2)

output: tMix2=5.0201steps

由此可知，猜想正确。

5 结论

有限、非周期、不可约的马尔科夫链必定存在唯一、与初始分布无关且保持不变平稳分布。

在我们的实验推断中，马尔科夫链收敛至稳态的速度和特征值序列中第二个特征值绝对值相关，如果特征值都是离散的（代数重数均为 1），那么第二个特征值的越小，马尔科夫链收敛越快。

6 参考文献

[1]曾勇等. <排队现象的建模、解析与模拟>.西安电子科技大学出版社.2011 年 9 月
[2]Fredrik Backåker. *The Google Markov Chain: convergence speed and eigenvalues*. U.U.D.M. Project Report 2012:14
[1]荣腾中, 肖智. 高阶马尔可夫链平稳分布的存在唯一性[J]. 系统工程理论与实践, 2013, 33(8):6.
[4]吴广艳等.<MATLAB 简明实例教程>.东南大学出版社.2016 年 1 月