MCMC(二)马尔科夫链

在MCMC(一)蒙特卡罗方法中，我们讲到了如何用蒙特卡罗方法来随机模拟求解一些复杂的连续积分或者离散求和的方法，但是这个方法需要得到对应的概率分布的样本集，而想得到这样的样本集很困难。因此我们需要本篇讲到的马尔科夫链来帮忙。

1. 马尔科夫链概述

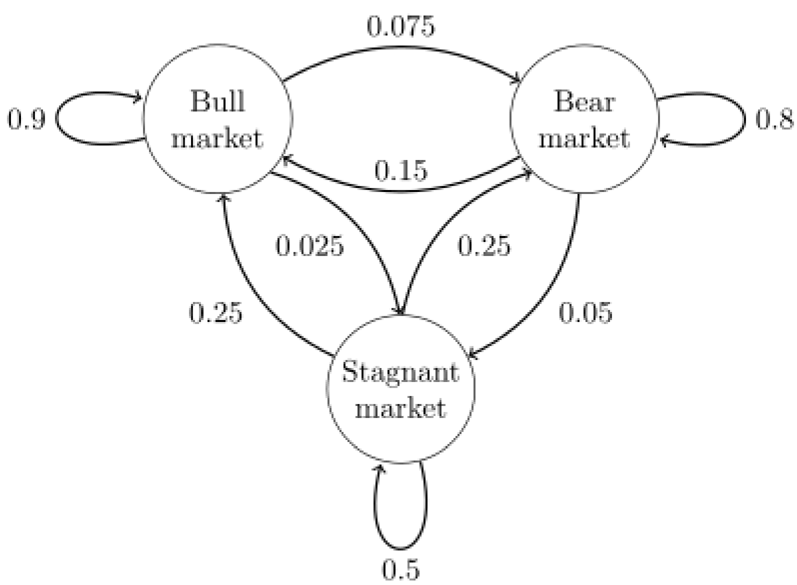
马尔科夫链定义本身比较简单，它假设某一时刻状态转移的概率只依赖于它的前一个状态。举个形象的比喻，假如每天的天气是一个状态的话，那个今天是不是晴天只依赖于昨天的天气，而和前天的天气没有任何关系。当然这么说可能有些武断，但是这样做可以大大简化模型的复杂度，因此马尔科夫链在很多时间序列模型中得到广泛的应用，比如循环神经网络RNN，隐式马尔科夫模型HMM等，当然MCMC也需要它。

如果用精确的数学定义来描述，则假设我们的序列状态是$\ldots X_{t-2}, X_{t-1}, X_t, X_{t+1}, \ldots$...Xt−2,Xt−1,Xt,Xt+1,...，那么我们的在时刻X_{t+1}Xt+1的状态的条件概率仅仅依赖于时刻X_tXt，即：

$$P(X_{t+1}|\ldots X_{t-2}, X_{t-1}, X_t) = P(X_{t+1}|X_t)$$

P(Xt+1|...Xt−2,Xt−1,Xt)=P(Xt+1|Xt)

既然某一时刻状态转移的概率只依赖于它的前一个状态，那么我们只要能求出系统中任意两个状态之间的转换概率，这个马尔科夫链的模型就定了。我们来看看下图这个马尔科夫链模型的具体的例子(来源于维基百科)。



这个马尔科夫链是表示股市模型的，共有三种状态：牛市（Bull market）, 熊市（Bear market）和横盘（Stagnant market）。每一个状态都以一定的概率转化到下一个状态。比如，牛市以0.025的概率转化到横盘的状态。这个状态概率转化图可以以矩阵的形式表示。如果我们定义矩阵阵P某一位置$P(i,j)$的值为$P(j|i)$,即从状态i转化到状态j的概率，并定义牛市为状态0， 熊市为状态1, 横盘为状态2. 这样我们得到了马尔科夫链模型的状态转移矩阵为：

$$P=\begin{pmatrix} 0.9 & 0.075 & 0.025 \\ 0.15 & 0.8 & 0.05 \\ 0.25 & 0.25 & 0.5 \end{pmatrix}$$

讲了这么多，那么马尔科夫链模型的状态转移矩阵和我们蒙特卡罗方法需要的概率分布样本集有什么关系呢？这需要从马尔科夫链模型的状态转移矩阵的性质讲起。

2. 马尔科夫链模型状态转移矩阵的性质

得到了马尔科夫链模型的状态转移矩阵，我们来看看马尔科夫链模型的状态转移矩阵的性质。

完整代码参见我的github:https://github.com/ljpzzz/machinelearning/blob/master/mathematics/mcmc_2.ipynb

仍然以上面的这个状态转移矩阵为例。假设我们当前股市的概率分布为：[0.3,0.4,0.3],即30%概率的牛市，40%概率的熊盘与30%的横盘。然后这个状态作为序列概率分布的初始状态t_0，将其带入这个状态转移矩阵计算$t_1, t_2, t_3...$的状态。代码如下：

```
import numpy as np
matrix = np.matrix([[0.9,0.075,0.025],[0.15,0.8,0.05],[0.25,0.25,0.5]], dtype=float)
vector1 = np.matrix([[0.3,0.4,0.3]], dtype=float)
for i in range(100):
    vector1 = vector1*matrix
    print "Current round:" , i+1
    print vector1
```

部分输出结果如下：

```
Current round: 1
[[ 0.405    0.4175   0.1775]]
Current round: 2
[[ 0.4715    0.40875   0.11975]]
Current round: 3
[[ 0.5156   0.3923   0.0921]]
Current round: 4
[[ 0.54591    0.375535   0.078555]]
。。。。。。
Current round: 58
[[ 0.62499999   0.31250001   0.0625     ]]
Current round: 59
[[ 0.62499999   0.3125       0.0625     ]]
Current round: 60
[[ 0.625    0.3125   0.0625]]
。。。。。。
Current round: 99
[[ 0.625    0.3125   0.0625]]
```

```
Current round: 100
[[ 0.625    0.3125   0.0625]]
```

可以发现，从第60轮开始，我们的状态概率分布就不变了，一直保持在[0.625　0.3125　0.0625]，即62.5%的牛市，31.25%的熊市与6.25%的横盘。那么这个是巧合吗？

我们现在换一个初始概率分布试一试，现在我们用[0.7,0.1,0.2]作为初始概率分布，然后这个状态作为序列概率分布的初始状态t_0t0，将其带入这个状态转移矩阵计算$t_1, t_2, t_3...$t1,t2,t3...的状态。代码如下：

```
matrix = np.matrix([[0.9,0.075,0.025],[0.15,0.8,0.05],[0.25,0.25,0.5]], dtype=float)
vector1 = np.matrix([[0.7,0.1,0.2]], dtype=float)
for i in range(100):
    vector1 = vector1*matrix
    print "Current round:" , i+1
    print vector1
```

部分输出结果如下：

```
Current round: 1
[[ 0.695    0.1825   0.1225]]
Current round: 2
[[ 0.6835    0.22875   0.08775]]
Current round: 3
[[ 0.6714   0.2562   0.0724]]
Current round: 4
[[ 0.66079    0.273415   0.065795]]
。。。。。。。
Current round: 55
[[ 0.62500001   0.31249999   0.0625     ]]
Current round: 56
[[ 0.62500001   0.31249999   0.0625     ]]
Current round: 57
[[ 0.625    0.3125   0.0625]]
。。。。。。。
Current round: 99
[[ 0.625    0.3125   0.0625]]
Current round: 100
[[ 0.625    0.3125   0.0625]]
```

可以看出，尽管这次我们采用了不同初始概率分布，最终状态的概率分布趋于同一个稳定的概率分布[0.625　0.3125　0.0625]， 也就是说我们的马尔科夫链模型的状态转移矩阵收敛到的稳定概率分布与我们的初始状态概率分布无关。这是一个非常好的性质，也就是说，如果我们得到了这个稳定概率分布对应的马尔科夫链模型的状态转移矩阵，则我们可以用任意的概率分布样本开始，带入马尔科夫链模型的状态转移矩阵，这样经过一些序列的转换，最终就可以得到符合对应稳定概率分布的样本。

这个性质不光对我们上面的状态转移矩阵有效，对于绝大多数的其他的马尔科夫链模型的状态转移矩阵也有效。同时不光是离散状态，连续状态时也成立。

同时，对于一个确定的状态转移矩阵P P，它的n次幂P^nPn在当n大于一定的值的时候也可以发现是确定的，我们还是以上面的例子为例，计算代码如下：

```
matrix = np.matrix([[0.9,0.075,0.025],[0.15,0.8,0.05],[0.25,0.25,0.5]], dtype=float)
for i in range(10):
    matrix = matrix*matrix
    print "Current round:" , i+1
    print matrix
```

输出结果如下：

```
Current round: 1
[[ 0.8275   0.13375  0.03875]
 [ 0.2675   0.66375  0.06875]
 [ 0.3875   0.34375  0.26875]]
Current round: 2
[[ 0.73555   0.212775  0.051675]
 [ 0.42555   0.499975  0.074475]
 [ 0.51675   0.372375  0.110875]]
。。。。。。
Current round: 5
[[ 0.62502532  0.31247685  0.06249783]
 [ 0.6249537   0.31254233  0.06250397]
 [ 0.62497828  0.31251986  0.06250186]]
Current round: 6
[[ 0.625   0.3125  0.0625]
 [ 0.625   0.3125  0.0625]
 [ 0.625   0.3125  0.0625]]
Current round: 7
[[ 0.625   0.3125  0.0625]
 [ 0.625   0.3125  0.0625]
 [ 0.625   0.3125  0.0625]]
。。。。。。
Current round: 9
[[ 0.625   0.3125  0.0625]
 [ 0.625   0.3125  0.0625]
 [ 0.625   0.3125  0.0625]]
Current round: 10
[[ 0.625   0.3125  0.0625]
 [ 0.625   0.3125  0.0625]
 [ 0.625   0.3125  0.0625]]
```

我们可以发现，在$n \ge 6$以后，P^n的值稳定不再变化，而且每一行都为[0.625 0.3125 0.0625]，这和我们前面的稳定分布是一致的。这个性质同样不光是离散状态，连续状态时也成立。

好了，现在我们可以用数学语言总结下马尔科夫链的收敛性质了：

如果一个非周期的马尔科夫链有状态转移矩阵P, 并且它的任何两个状态是连通的，那么$\lim_{n\to\infty} P_{ij}^n$与i无关，我们有：

1）

$$\lim_{n\to\infty} P_{ij}^n = \pi(j)$$

2）

$$\lim_{n\to\infty} P^n = \begin{pmatrix} \pi(1) & \pi(2) & \ldots & \pi(j) & \ldots \\ \pi(1) & \pi(2) & \ldots & \pi(j) & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \pi(1) & \pi(2) & \ldots & \pi(j) & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix}$$

3）

$$\pi(j) = \sum_{i=0}^{\infty} \pi(i)P_{ij}$$

4) π是方程$\pi P = \pi$的唯一非负解，其中：

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

上面的性质中需要解释的有：

1）非周期的马尔科夫链：这个主要是指马尔科夫链的状态转化不是循环的，如果是循环的则永远不会收敛。幸运的是我们遇到的马尔科夫链一般都是非周期性的。用数学方式表述则是：对于任意某一状态i，d为集合$\{n \mid n \geq 1, P_{ii}^n > 0\}$ 的最大公约数，如果 $d = 1$ ，则该状态为非周期的

2）任何两个状态是连通的：这个指的是从任意一个状态可以通过有限步到达其他的任意一个状态，不会出现条件概率一直为0导致不可达的情况。

3）马尔科夫链的状态数可以是有限的，也可以是无限的。因此可以用于连续概率分布和离散概率分布。、

4）π通常称为马尔科夫链的平稳分布。

3. 基于马尔科夫链采样

如果我们得到了某个平稳分布所对应的马尔科夫链状态转移矩阵，我们就很容易采用出这个平稳分布的样本集。

假设我们任意初始的概率分布是$\pi_0(x)$, 经过第一轮马尔科夫链状态转移后的概率分布是$\pi_1(x)$，。。。第i轮的概率分布是$\pi_i(x)$。假设经过n轮后马尔科夫链收敛到我们的平稳分布$\pi(x)$，即：

$$\pi_n(x) = \pi_{n+1}(x) = \pi_{n+2}(x) = ... = \pi(x)$$

对于每个分布$\pi_i(x)$，我们有：

$$\pi_i(x) = \pi_{i-1}(x)P = \pi_{i-2}(x)P^2 = \pi_0(x)P^i$$

现在我们可以开始采样了，首先，基于初始任意简单概率分布比如高斯分布$\pi_0(x)$采样得到状态值x_0，基于条件概率分布$P(x|x_0)$采样状态值x_1，一直进行下去，当状态转移进行到一定的次数时，比如到n次时，我们认为此时的采样集$(x_n, x_{n+1}, x_{n+2}, ...)$即是符合我们的平稳分布的对应样本集，可以用来做蒙特卡罗模拟求和了。

总结下基于马尔科夫链的采样过程：

1）输入马尔科夫链状态转移矩阵P P，设定状态转移次数阈值n_1n1，需要的样本个数n_2n2

2）从任意简单概率分布采样得到初始状态值x_0x0

3）for $t = 0$t=0 to $n_1 + n_2 - 1$n1+n2−1: 从条件概率分布$P(x|x_t)$ P(x|xt)中采样得到样本x_{t+1}xt+1

样本集$(x_{n_1}, x_{n_1+1}, \ldots, x_{n_1+n_2-1})$ (xn1,xn1+1,...,xn1+n2−1)即为我们需要的平稳分布对应的样本集。

4. 马尔科夫链采样小结

如果假定我们可以得到我们需要采样样本的平稳分布所对应的马尔科夫链状态转移矩阵，那么我们就可以用马尔科夫链采样得到我们需要的样本集，进而进行蒙特卡罗模拟。但是一个重要的问题是，随意给定一个平稳分布ππ,如何得到它所对应的马尔科夫链状态转移矩阵P P呢？这是个大问题。我们绕了一圈似乎还是没有解决任意概率分布采样样本集的问题。

幸运的是，MCMC采样通过迂回的方式解决了上面这个大问题，我们在下一篇来讨论MCMC的采样，以及它的使用改进版采样: M-H采样和Gibbs采样.

（欢迎转载，转载请注明出处。欢迎沟通交流： liujianping-ok@163.com）

评论列表

#1楼 2017-11-03 11:48 JoeLee2017
该说什么好呢，写得简直不要太通俗易懂了。哈哈哈哈哈哈，谢谢您的付出
支持(7)反对(0)

#2楼 2018-05-19 12:11 turing袁
您的每一篇文章我都在研读中！ 感谢！ 大神我想请问一下 我不太理解这个采样 均匀分布采样我还能想到是怎么做的 那最后这里“从条件概率分布P(x|xt)中采样得到样本xt+1” 这是怎么做到的？？
支持(2)反对(0)

#3楼[楼主] 2018-05-19 13:37 刘建平Pinard
@ turing袁
你好，这里只是按概率采样一个样本而已。由于我们有状态转移矩阵P，所以每一次，在现有$X_t$xt情况下，我们可以得到待采样样本在各个可能取值的分布。比如有3个取值的时候，取值概率分别是0.1,0.2,0.7，那么采样是很容易的。
比如基于均匀采样，那么在[0,1]之间采样到小于等于0.1的则是第一个取值，以此类推。
支持(3)反对(0)

#4楼 2018-05-19 13:43 turing袁
@ 刘建平Pinard
感谢！
支持(0)反对(0)

#5楼 2018-06-27 09:34 yalesaleng
博主你好，请问第三小节中，由于概率是稳定分布的，那么是不是可以说平稳采样集(xn,xn+1,xn+2....)中的值全都是一样的，那这样的采样意义何在呢？
支持(0)反对(0)

#6楼[楼主] 2018-06-27 22:12 刘建平Pinard
@ yalesaleng
你好，平稳采样集(xn,xn+1,xn+2....)中的值符合我们需要采样的概率分布律，并不是说这些值都是一样的。如果平稳采样集都是一样的，那这个概率分布就是
$P(x=a)=1, P(x \neq a)=0$ P(x=a)=1,P(x≠a)=0
支持(0)反对(0)

#7楼 2018-06-29 18:12 renminghuang
老师您好：
如果是从条件概率分布P(x|xt)中采样得到样本xt+1，那为什么一定要等到n1轮（概率分布收敛于平稳分布）后才采用抽样样本呢？我直接从第1轮抽样并采用也一样啊（毕竟对于有限个抽样取值，下一轮的抽样概率分布即是状态转移矩阵的某一行，且保持不变），完全没必要等到n1轮。
如果是从n1轮后才采用抽样样本，那每轮抽样应该是根据pi（x）才对，这样才满足n1轮后pi（x）的概率分布收敛于平稳分布，后续抽样值才可用。
支持(0)反对(0)

#8楼[楼主] 2018-07-01 22:09 刘建平Pinard
@ renminghuang
你好，第一轮抽样的$\pi_1(x)$π1(x)和最后稳定的$\pi(x)$π(x)是不一致的。
你可以看我第二节举的第一个例子。如果你使用开始的股市的概率分布为：[0.3,0.4,0.3]，那么采样得到的数据大概率是3:4:3的分布，不是我们真正趋于稳定时候的分布[0.625 0.3125 0.0625]， 而我们期望采样的分布是从[0.625 0.3125 0.0625]里面得到的，即采样得到的样本的比例大概符合0.625: 0.3125 :0.0625
支持(0)反对(0)

#9楼 2018-07-02 10:36 renminghuang
@ 刘建平Pinard
老师您好：
可能我没表述清楚意思。
以股市为例，如您所说，我们的目标是当概率分布区域稳定时抽样并采用，如[0.625 0.3125

0.0625]，即pi(x)
但在下述基于马尔科夫链采样过程中，
3）for t=0 to n1+n2−1: 从条件概率分布P(x|xt)中采样得到样本xt+1
抽样是基于条件概率分布P(x|xt)的，在股市的例子中，抽样根据xt的取值，按照[0.9 0.15 0.25]，或[0.075 0.8 0.25]，或[0.025 0.05 0.5]分布进行。
我的困惑是，此时的抽样方法，或者说抽样所依据的概率分布，和pi(x)不一致，为什么不直接根据pi(x)抽样，而是根据P(x|xt)抽样？
支持(0)反对(0)

#10楼[楼主] 2018-07-03 10:56 刘建平Pinard
@ renminghuang
你好，理解你的意思了。这里的关键是很多时候我们无法直接对pi(x)抽样，这时候需要MCMC这样的方法来得到采样样本。

对于上面那个股市的例子来说，的确，我们根本不需要那么麻烦去MCMC采样，直接采样就搞定了。这里这么做主要是为了用一个简单的例子理解MCMC采样的流程。
支持(0)反对(0)

#11楼 2018-07-04 21:00 爱学习的三日
老师，你好！在马尔科夫链的收敛性质（3）中，该式不是全概率公式吗？难道不是对于任何迭代步都满足而不是仅当收敛的时候才满足吗？
支持(0)反对(0)

#12楼 2018-07-04 22:04 爱学习的三日
@ 刘建平Pinard
老师，你好！在马尔科夫链的收敛性质（3）中，该式不是全概率公式吗？难道不是对于任何迭代步都满足而不是仅当收敛的时候才满足吗？
支持(0)反对(0)

#13楼[楼主] 2018-07-05 11:36 刘建平Pinard
@ 爱学习的三日
你好，这里不是全概率公式，注意这里做的是状态转移概率，而不是概率分布概率。
"难道不是对于任何迭代步都满足而不是仅当收敛的时候才满足吗？"： 只有收敛的时候乘以状态转移矩阵概率分布不变，其他时候乘了以后是会变的。
支持(0)反对(0)

#14楼 2018-07-06 19:18 爱学习的三日
@ 刘建平Pinard
谢谢老师！我所理解的马尔科夫链状态转移矩阵Pi,j是P(j|i)，也就是状态j在状态i下的条件概率，请问这里是不能理解为条件概率吗？
支持(0)反对(0)

#15楼[楼主] 2018-07-08 22:20 刘建平Pinard
@ 爱学习的三日
你好，的确是状态本身转移的条件概率。和全概率公式里的还是稍有不同。全概率公式里的条件概率一般指的是两种不同事件之间条件概率。
支持(0)反对(0)

#16楼 2018-08-09 00:30 一直在用心

博主好，感谢您写的所有东西，我一路看过来的。
这里想说的是，其实这个状态矩阵P这样一直乘，最后收敛到一个向量，这是数值分析课程里的使用幂法求主特征值和对应特征向量，和这里是相通的。
支持(0)反对(0)

#17楼[楼主] 2018-08-09 11:04 刘建平Pinard
@ 一直在用心
你好，幂法求矩阵特征值的思路的确和这样非常类似的。感谢指出。
支持(0)反对(0)

#18楼 2018-08-29 13:55 飞扬扬
@刘建平Pinard
博主你好！有个问题想请教一下。复制一下马尔科夫链的采样过程：
1）输入马尔科夫链状态转移矩阵P，设定状态转移次数阈值n1，需要的样本个数n2
2）从任意简单概率分布采样得到初始状态值x0
3）for t=0 to n1+n2?1: 从条件概率分布P(x|xt)中采样得到样本xt+1，样本集(xn1,xn1+1,...,xn1+n2?1)即为我们需要的平稳分布对应的样本集。

第二步的简单概率分布只是用于生成初始状态值，并未作为输入直接参与到链的后续生成，而且下一状态的采样只取决于当前状态和对应的条件概率分布，而转移矩阵对初始概率分布的一步步改变直到收敛这个过程，并没有直接的体现。请问这个过程是如何实现的？一是在只输入x0的情况下链如何判断用的什么初始分布？二是整个收敛过程难道是一个和链的生成同步进行的隐藏过程吗？
支持(0)反对(0)

#19楼[楼主] 2018-08-30 10:24 刘建平Pinard
@ 飞扬扬
你好，这个是否收敛只与状态转移矩阵P有关，只要P是确定的，那么最后收敛的概率分布是确定的，那么采样的分布也是确定的。

所以在初始化的时候，x_0x0来自于什么分布我们不关心。因为这个初始分布不影响最终的收敛。

请问这个过程是如何实现的？----->请参考第二节的那个python程序实例过程。

一是在只输入x0的情况下链如何判断用的什么初始分布？---->理论上没有要求，均匀分布都行。初始分布影响的只是收敛的速度。

二是整个收敛过程难道是一个和链的生成同步进行的隐藏过程吗？---> 是的，随着链的生成，到某一个节点，采样分布就已经收敛了。
支持(0)反对(0)

#20楼 2018-09-16 21:02 ichengs
老师您好！
我想问一下，按文中说的，Xn1状态有可能回到X0状态，当第n1个状态又回到了第0个状态了，那岂不是前面0到n1次的跳转白做了，这样一来为何不直接从第0个状态开始采样呢
支持(0)反对(0)

#21楼 2018-09-16 21:05 ichengs
希望老师能用python写个采样的例子，将过程简单的模拟一遍，这样更能理解，谢谢！
支持(0)反对(0)

#22楼[楼主] 2018-09-17 11:09 刘建平Pinard
@ ichengs
你好，我们采样的是一个数据分布，即数据整体的分布情况，而不会特意关注于分布中某一个数据的取值。因此就算重新出现了x_0x0,也不能说前面0到n1次的跳转白做了。

另一个角度，我们容易给一个二维的数据（0.1,0.3），我们根本无法知道它是从一个什么分布中采样得到的。可能是均匀分布，正态分布，也可以是其他分布。

采样的例子其实依照我第二节的这个矩阵P，就可以很容易写出来，有机会我写一个，你也可以试一试，并不难，参考我第三节的算法流程即可。
支持(0)反对(0)

#23楼 2018-09-18 12:02 南鱼知刃
@ 刘建平Pinard
@JoeLee2017
您好，应该是根据P^n(x|xt)采样，而不是P(x|xt)吧
支持(0)反对(0)

#24楼[楼主] 2018-09-18 14:29 刘建平Pinard
@ 南鱼知刃
你好，采样还是基于$P(x|x_t)$ P(x|xt)的，而不是$P^n(x|x_t)$ Pn(x|xt)。使用的是性质3.
上面出现的$P^n(x|x_t)$ Pn(x|xt)主要是为了描述马尔科夫链的状态转移矩阵的性质1。实际采样并未使用。
支持(0)反对(0)

#25楼 2018-09-18 14:33 南鱼知刃
@ 刘建平Pinard
您好，这样的话，从您的算法描述中没看到P的更新啊，那该如何收敛到平稳分布呢
支持(0)反对(0)

#26楼 2018-09-18 14:45 南鱼知刃
@ 刘建平Pinard
还是说，算法中每对$P(x|x_t)$ P(x|xt)采样一次就意味着模拟了一次
$\pi_i(x) = \pi_{i-1}(x)P$ πi(x)=πi−1(x)P操作
支持(0)反对(0)

#27楼[楼主] 2018-09-19 10:09 刘建平Pinard
@ 南鱼知刃
你好，你说的对，每次采样就模型了一次状态分布ππ转化的过程。在此过程中，状态转化矩阵P没有变化。
支持(0)反对(0)
刷新评论刷新页面返回顶部
注册用户登录后才能发表评论，请 登录 或 注册，访问网站首页。