

**Key concepts:**

- 可约性;
- 周期性;
- 常返性。

状态的性质会影响整个Markov链的性质，而链中状态的数目往往很大，研究每一个状态的性质比较繁琐，所以对Markov链的状态分类对研究Markov链是非常重要的。

**5.1 可约性与周期性**

本节从Markov链转移的代数性质出发，讨论可约性与周期性。先给出一些定义。

**Definition 5.1 (可达)** 设 $i, j \in E$ 是Markov链中的两个状态，如果 $\exists n \geq 0$ ，使得

$$P_{ij}^{(n)} > 0$$

就称状态 $i$ 可达(*accessible*)状态 $j$ ，记作 $i \rightarrow j$ 。如果 $i$ 不可达 $j$ ，即 $\forall n > 0, P_{ij}^{(n)} = 0$ ，记为 $i \nrightarrow j$ 。状态 $i$ 可达 $j$ 意味着可以在链中找到一条路径，起点是 $i$ ，终点是 $j$ 。

注. 可达具有传递性，设 $i, j, k \in E$ ， $n, m > 0$ ，使得 $P_{ij}^{(n)} > 0$ ， $P_{jk}^{(m)} > 0$ ，则

$$P_{ik}^{(n+m)} = \sum_{j' \in E} P_{ij'}^{(n)} P_{j'k}^{(m)} \geq P_{ij}^{(n)} P_{jk}^{(m)} > 0$$

即若 $i \rightarrow j$ ， $j \rightarrow k$ ，则 $i \rightarrow k$ 。

**Definition 5.2 (互通)** 设  $i, j \in E$  是 Markov 链中的两个状态, 如果  $\exists n, m \geq 0$  使得

$$P_{ij}^{(n)} > 0, \quad P_{ji}^{(m)} > 0$$

就称  $i$  和  $j$  互通 (communicate), 记作  $i \leftrightarrow j$ 。即, 如果  $i$  可达  $j$ ,  $j$  又可达  $i$ , 那么  $i$  和  $j$  就是互通的。

**Proposition 5.3** 互通是状态集合  $E$  上的一个等价关系, 即满足:

1. 自反性:  $i \leftrightarrow i$ ;
2. 对称性: 若  $i \leftrightarrow j$ , 则  $j \leftrightarrow i$ ;
3. 传递性: 若  $i \leftrightarrow j$ ,  $j \leftrightarrow k$ , 则  $i \leftrightarrow k$

**Proof:** 1. 自反性: 对于任意状态  $i \in E$ , 由于  $P_{ii}^{(0)} = 1$ , 因此  $i \leftrightarrow i$  成立。

2. 对称性: 如果  $i \leftrightarrow j$ , 则根据定义, 存在正整数  $n, m$  使得

$$P_{ij}^{(n)} > 0, \quad P_{ji}^{(m)} > 0.$$

于是, 我们也有  $j \leftrightarrow i$ , 即互通关系是对称的。

3. 传递性: 由可达的传递性即得;

综上所述, 互通关系  $\leftrightarrow$  是状态空间  $E$  上的一个等价关系, 因此所有互通的状态构成等价类, 被称为互通类 (communicating class) ■

**Definition 5.4 (不可约性)** 一个 Markov 链称为不可约的 (irreducible), 如果它的互通类只有一个 (状态集合本身), 即所有状态都是互通的。

**注1.** 这不是我们第一次接触可约性, 回顾矩阵的可约性:

设  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  是一个  $n$  阶方阵, 称  $A$  可约 (reducible), 如果存在一个置换矩阵  $P$ , 使得  $P^T A P$  可以写成如下上三角分块形式:

$$P^T A P = \begin{bmatrix} B & C \\ 0 & D \end{bmatrix}$$

如果矩阵  $A$  不能被写成上述形式, 则称其为不可约的。

一个Markov链不可约, 当且仅当, 它的转移矩阵不可约。

下面讨论状态的周期性

**Definition 5.5 (周期性)** 状态  $i \in E$  的周期(*period*)定义为

$$d_i \triangleq \gcd\{n : P_{ii}^{(n)} > 0\}$$

即集合  $\{n : P_{ii}^{(n)} > 0\}$  的最大公约数。若  $d_i = 1$ , 则称状态  $i$  是非周期的(*aperiodic*)。

**Proposition 5.6** 若  $i \leftrightarrow j$ , 则  $d_i = d_j$ 。

**Proof:** 由于  $i \leftrightarrow j$ , 故存在  $m, n$ , 使得

$$P_{ij}^{(m)} > 0, \quad P_{ji}^{(n)} > 0$$

又  $d_j$  为状态  $j$  的周期, 所以存在  $k$ ,

$$P_{jj}^{(kd_j)} > 0, \quad P_{jj}^{((k+1)d_j)} > 0$$

那么

$$\begin{aligned} P_{ii}^{(m+kd_j+n)} &\geq P_{ij}^{(m)} P_{jj}^{(kd_j)} P_{ji}^{(n)} > 0 \\ P_{ii}^{(m+(k+1)d_j+n)} &\geq P_{ij}^{(m)} P_{jj}^{((k+1)d_j)} P_{ji}^{(n)} > 0 \end{aligned}$$

即

$$d_i \mid (m + kd_j + n), \text{ 且 } d_i \mid (m + (k+1)d_j + n)$$

故  $d_i \mid d_j$ 。同理可证  $d_j \mid d_i$ , 故  $d_i = d_j$ . ■

利用周期性, 可以在一个互通类中进一步对状态进行分类, 下面不妨考虑不可约Markov链。

由于不可约，由命题5.6，每个状态的周期相同，记为 $d$ 。给定某个状态 $i_0$ ，我们定义下面集合

$$\begin{aligned} C_0 &= \{j \in E, P_{i_0 j}^{(n)} > 0, n \equiv 0(\text{mod } d)\} \\ C_1 &= \{j \in E, P_{i_0 j}^{(n)} > 0, n \equiv 1(\text{mod } d)\} \\ &\vdots \\ C_{d-1} &= \{j \in E, P_{i_0 j}^{(n)} > 0, n \equiv d-1(\text{mod } d)\} \end{aligned}$$

那么状态集合 $E$ 可以分解为 $E = C_0 \cup C_1 \cup \cdots \cup C_{d-1}$ 。

**Proposition 5.7** 若状态 $i \in C_p$ ，且 $P_{ij} > 0$ ，那么 $j \in C_{p+1}$

**Proof:** 由于 $i \in C_p$ ，则存在 $a = kd + p$ ，其中 $k$ 为某个自然数，使得

$$P_{i_0 i}^{(a)} > 0$$

对于 $a+1 = kd + p + 1$

$$P_{i_0 j}^{(a+1)} \geq P_{i_0 i}^{(a)} P_{ij} > 0$$

即 $j \in C_{p+1}$ . ■

这说明不可约周期Markov链的转移具有规律：当 $0 \leq k \leq d-1$ 时，从 $C_k$ 中的状态转移到 $C_{k+1}$ ，然后从 $C_{d-1}$ 转移回到 $C_0$ ，即经过适当的行列置换后，它的转移矩阵可以表示为

$$P = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{A}_{0,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{A}_{1,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \mathbf{A}_{d-2,d-1} \\ \mathbf{A}_{d-1,0} & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

其中 $\mathbf{A}_{k,k+1}$ 表示从 $C_k$ 中的状态转移到 $C_{k+1}$ 的转移概率矩阵。

思考：计算 $P^2, P^3, \dots$ 看看有什么规律。

## 5.2 常返性

本节从讨论状态在Markov链转移过程中的渐近特性出发，讨论常返性。先给出一些定义。

**Definition 5.8 (首次时)** 设 $\{X_n\}$ 为一个状态空间为 $E$ 的Markov链, 从 $n = 0$ 出发首次达到状态 $j \in E$ 的时刻定义为

$$\tau_j \triangleq \inf\{n \geq 1 : X_n = j\}$$

若 $\{n \geq 1 : X_n = j\}$ 为空集, 则 $\tau_j \triangleq \infty$ .

**Definition 5.9 (首次概率)** 设 $\{X_n\}$ 为一个状态空间为 $E$ 的Markov链, 则经过 $n$ 步从状态 $i$ 到 $j$ 的首达概率定义为

$$\begin{aligned} f_{ij}^{(n)} &\triangleq P(\tau_j = n | X_0 = i) \\ &= P(X_n = j, X_{n-1} \neq j, \dots, X_1 \neq j | X_0 = i) \end{aligned}$$

注. 定义事件

$$A_n \triangleq \{X_n = j, X_{n-1} \neq j, \dots, X_1 \neq j | X_0 = i\}$$

则 $\{A_n\}$ 互不相容, 即

$$A_n \cap A_m = \phi, \quad n \neq m$$

那么从状态 $i$ 出发迟早到达状态 $j$ 的概率为

$$f_{ij} \triangleq P(\tau_j < \infty | X_0 = i) = P\left(\bigcup_{k=1}^{\infty} A_k | X_0 = i\right) = \sum_{n=1}^{\infty} f_{ij}^{(n)} \leq 1$$

下面定义常返性。

**Definition 5.10 (常返性)** 如果

$$f_{ii} = \sum_{n=1}^{\infty} f_{ii}^{(n)} = 1$$

则称状态 $i$ 是常返的(*Recurrent*), 否则称 $i$ 为暂留的(*Transient*), 或者非常返的(*Nonrecurrent*)。

虽然我们通过 $f_{ij}$ 来定义常返性, 但 $f_{ij}^{(n)}$ 的计算并不容易, 所以我们想要通过 $n$ 步转移概率 $P_{ij}^{(n)}$ 来计算, 通过 $P_{ij}^{(n)}$ 来获得状态是否是常返的判据, 这即是下面的定理:

**Theorem 5.11** 状态*i*是常返态的充分必要条件是

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_{ii}^{(n)} = \infty$$

**Proof:** 注意到事件

$$A_n \triangleq \{X_n = j, X_{n-1} \neq j, \dots, X_1 \neq j | X_0 = i\}$$

互不相容，考虑基于此对样本轨道进行分解

$$\begin{aligned} P_{ij}^{(n)} &= P(X_n = j | X_0 = i) \\ &= \sum_{k=1}^n P(X_n = j, X_k = j, X_{k-1} \neq j, \dots, X_1 \neq j | X_0 = i) \\ &= \sum_{k=1}^n P(X_n = j | X_k = j, X_{k-1} \neq j, \dots, X_1 \neq j, X_0 = i) P(X_k = j, X_{k-1} \neq j, \dots, X_1 \neq j | X_0 = i) \\ &= \sum_{k=1}^n P(X_n = j | X_k = j) P(X_k = j, X_{k-1} \neq j, \dots, X_1 \neq j | X_0 = i) \\ &= \sum_{k=1}^n f_{ij}^{(k)} P_{jj}^{(n-k)} \end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} P_{ij}^{(n)} z^n &= \delta_{ij} + \sum_{n=1}^{\infty} P_{ij}^{(n)} z^n \\ &= \delta_{ij} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^n f_{ij}^{(k)} P_{jj}^{(n-k)} z^n \\ &= \delta_{ij} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^n (f_{ij}^{(k)} z^k) (P_{jj}^{(n-k)} z^{n-k}) \\ &= \delta_{ij} + \sum_{k=1}^{\infty} (f_{ij}^{(k)} z^k) \sum_{n=k}^{\infty} (P_{jj}^{(n-k)} z^{n-k}) \\ &= \delta_{ij} + \sum_{k=1}^{\infty} (f_{ij}^{(k)} z^k) \sum_{m=0}^{\infty} (P_{jj}^{(m)} z^m) \end{aligned}$$

那么

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_{ii}^{(n)} z^n = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} (f_{ii}^{(k)} z^k) \sum_{n=0}^{\infty} (P_{ii}^{(n)} z^n)$$

即

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_{ii}^{(n)} z^n = \frac{1}{1 - \sum_{k=1}^{\infty} f_{ii}^{(k)} z^k}$$

令  $z \rightarrow 1^-$ , 由Abel定理可得

$$\sum_{n=1}^{\infty} P_{ii}^{(n)} = \frac{1}{1 - f_{ii}}$$

那么  $f_{ii} = 1$  即等价于  $\sum_{n=0}^{\infty} P_{ii}^{(n)} = \infty$  ■

**注1.** 另一种概率方法的证明:

由  $f_{ii}$  的定义, Markov链  $\{X_n\}$  从状态  $i$  出发, 最终能回到  $i$  的概率为  $f_{ii}$ , 那么一直回不到  $i$  的概率为  $1 - f_{ii}$ .

由于Markov性, 所以在回到  $i$  之后, 过程在概率意义下又重新开始, 那么  $X_0 = i$  开始, Markov链  $\{X_n\}$  恰有  $n$  次处于状态  $i$  服从几何分布,

$$P\{X_n \text{ 处于状态 } i \text{ 的次数} = n \mid X_0 = i\} = f_{ii}^{n-1}(1 - f_{ii})$$

所以, 从  $i$  出发以后, 处于  $i$  次数的期望为

$$\sum_{n=1}^{\infty} n f_{ii}^{n-1} (1 - f_{ii}) = \frac{1}{1 - f_{ii}}$$

那么  $i$  是常返态, 当且仅当

$$\mathbb{E}[X_n \text{ 处于状态 } i \text{ 的次数} \mid X_0 = i] = \infty$$

记随机序列  $I_n$  为: 当  $X_n = i$  时  $I_n = 1$ , 否则为0, 那么  $\sum_{n=0}^{\infty} I_n$  表示处于状态  $i$  的次数, 则有

$$\mathbb{E}\left[\sum_{n=1}^{\infty} I_n \mid X_0 = i\right] = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{E}[I_n \mid X_0 = i] = \sum_{n=1}^{\infty} P(X_n = i \mid X_0 = i) = \sum_{n=1}^{\infty} P_{ii}^{(n)}$$

故状态  $i$  是常返态的充分必要条件是  $\sum_{n=0}^{\infty} P_{ii}^{(n)} = \infty$ .

**注2.** 从注1的证明过程中, 我们可以看出若状态  $i$  是暂留的, 则Markov链只会有限次处于状态  $i$ , 可以具体表述为下面推论。

**Corollary 5.12** 如果状态  $j$  是暂留的, 那么对任意状态  $i$ ,

$$P_{ij}^{(n)} \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty$$

**Proof:** 若  $j = i$  是暂留的, 我们已经证明:

$$\sum_{n=1}^{\infty} P_{ii}^{(n)} = \frac{1}{1 - f_{ii}} < \infty$$

所以级数的通项  $\lim_{n \rightarrow \infty} P_{ij}^{(n)} = 0$ .

另一方面, 若  $j \neq i$  是暂留的, 我们已经证明:

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_{ij}^{(n)} = \delta_{ij} + \sum_{k=1}^{\infty} f_{ij}^{(k)} \sum_{n=0}^{\infty} P_{jj}^{(n)} = \sum_{n=1}^{\infty} f_{ij}^{(n)} \sum_{n=0}^{\infty} P_{jj}^{(n)} < \infty$$

所以级数的通项  $\lim_{n \rightarrow \infty} P_{ij}^{(n)} = 0$ . ■

**注3.** 常返与非常返具有类的性质

**Corollary 5.13** 若状态  $i$  是常返的, 且  $i \leftrightarrow j$ , 则  $j$  是常返的。

**Proof:** 由于  $i \leftrightarrow j$ , 则存在  $m$  和  $n$  使得

$$P_{ij}^{(n)} > 0, \quad P_{ji}^{(m)} > 0$$

对任意  $s > 0$ , 由CK方程有

$$P_{jj}^{(m+n+s)} \geq P_{ji}^{(m)} P_{ii}^{(s)} P_{ij}^{(n)}$$

由于状态  $i$  是常返的, 即  $\sum_{s=0}^{\infty} P_{ii}^{(s)} = \infty$ , 所以

$$\sum_{s=0}^{\infty} P_{jj}^{(m+n+s)} \geq P_{ji}^{(m)} P_{ij}^{(n)} \sum_{s=0}^{\infty} P_{ii}^{(s)} = \infty$$

由定理5.11,  $j$  是常返的. ■

上面的推论表明常返与非常返是互通类的性质, 因此我们可以说一个状态的集合为一个常返类或非常返类。如果Markov链不可约, 则所有状态或者都常返, 或者都非常返。此时, 我们也可说Markov链是常返的或非常返的。

**注4.** 有的文献也称  $\sum_{n=0}^{\infty} P_{ij}^{(n)}$  为格林函数, 记为  $G_{ij}$ .

如果Markov链的状态是有限的, 常返性的判定会更加简化, 有下面结论:



**Proposition 5.14** 有限状态Markov链必然存在常返态。

**Proof:** 反证法，若命题不成立。设状态空间  $E = \{1, 2, \dots, N\}$ ，则所有状态都是暂留的。固定状态  $i$ ，对任意  $j$ ，由推论5.12

$$P_{ij}^{(k)} \rightarrow 0, \quad k \rightarrow \infty$$

所以

$$\sum_{j=1}^N P_{ij}^{(k)} \rightarrow 0, \quad k \rightarrow \infty$$

但是由转移概率的性质，对任意  $k$  有

$$\sum_{j=1}^N P_{ij}^{(k)} = 1$$

矛盾！故命题成立。 ■

注. 结合推论5.13，我们知道：对于状态有限不可约Markov链，所有状态都是常返态。

**Example 5.15** ( $d$  维简单随机游走的常返性) 设  $\xi_1, \xi_2, \dots$  是取值于  $E = \mathbb{Z}^d$  独立同分布随机向量，满足

$$P(\xi_1 = e_i) = P(\xi_1 = -e_i) = \frac{1}{2d}, \quad i = 1, \dots, d$$

其中  $e_i$  是第  $i$  个坐标为1，其余为0的方向向量。

设  $S_0$  独立于  $\xi_1, \xi_2, \dots$ ，令

$$S_n := S_0 + \xi_1 + \dots + \xi_n = S_{n-1} + \xi_n.$$

则  $S_n$  为从  $S_0$  出发的  $d$  维简单随机游走。

当  $d = 1, 2$  时， $S_n$  是常返的，当  $d \geq 3$  时， $S_n$  是非常返的。

**Proof:** 不妨假设  $S_0 = 0$ ，由  $\xi_i$  的定义，所有状态都是互通的，即  $S_n$  不可约，所以所有状态的常返性一致，因此我们只考虑0状态的常返性。

容易注意到经过奇数步不可能回到状态0，若经过 $2n$ 步回到0，那么对任意方向 $i \in \{1, \dots, d\}$ ，必须在该方向前进和后退相同的步数，记为 $n_i$ ，于是

$$P_{00}^{(2n)} = \sum_{n_1 + \dots + n_d = n} \frac{(2n)!}{(n_1!)^2 \dots (n_d!)^2} \frac{1}{(2d)^{2n}}.$$

$d = 1$ 时

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_{00}^{(2n)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n)!}{(n!)^2} \frac{1}{2^{2n}}.$$

由Stirling公式  $\lim_{n \rightarrow \infty} n! = \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n$ ，对任意的 $\epsilon > 0$ ，存在 $n_0$ ，当 $n > n_0$ 时，

$$(1 - \epsilon) \frac{1}{\sqrt{\pi n}} \leq \frac{(2n)!}{(n!)^2} \frac{1}{2^{2n}} \leq (1 + \epsilon) \frac{1}{\sqrt{\pi n}}.$$

所以 $\sum_{n=0}^{\infty} P_{00}^{(2n)} = \infty$ ，即 $S_n$ 常返。

$d = 2$ 时，

$$\begin{aligned} P_{00}^{(2n)} &= \sum_{n_1 + n_2 = n} \frac{(2n)!}{(n_1!)^2 (n_2!)^2} \cdot \frac{1}{4^{2n}} \\ &= \frac{(2n)!}{n! n!} \cdot \frac{1}{4^{2n}} \sum_{n_1 + n_2 = n} \frac{n!}{n_1! n_2!} \cdot \frac{n!}{n_2! n_1!} \\ &= C_{2n}^n \cdot \frac{1}{4^{2n}} \sum_{n_1=0}^n C_n^{n_1} C_n^{n-n_1} \\ &= C_{2n}^n \cdot \frac{1}{4^{2n}} \cdot C_{2n}^n = \left( C_{2n}^n \frac{1}{2^{2n}} \right)^2 \\ &\approx \frac{1}{\pi n} \end{aligned}$$

所以 $\sum_{n=0}^{\infty} P_{00}^{(2n)} = \infty$ ，即 $S_n$ 常返。

当 $d \geq 3$ 时，可以证明，当 $n$ 充分大时，有

$$P_{00}^{(2n)} \leq C_d \cdot n^{-d/2},$$

其中 $C_d$ 是依赖于 $d$ 的常数。(参考《应用随机过程》，陈大岳、章复熹，北京大学出版社，2023，P95-P99)

所以 $\sum_{n=0}^{\infty} P_{00}^{(2n)} < \infty$ ，即 $S_n$ 非常返。 ■

这表明一维或二维的简单随机游动一定能回到起点，但三维以上的简单随机游动却不一定。日本学者角谷静夫 Kakutani 在加利福尼亚大学洛杉矶分校 (UCLA) 演讲时对此给出了一个有趣的注解：“A drunk man will find his way home, but a drunk bird may get lost forever.”