第十二节 · 离散时间马尔可夫链

司继春

上海对外经贸大学统计与信息学院

这一节我们将介绍一类非常重要的随机过程，即马尔可夫过程。马尔可夫过程在理论和实践中都有非常重要的应用，比如在蒙特卡洛方法中的 MCMC 以及机器学习中的隐马尔可夫模型（HMM）等。我们先从随机矩阵开始引入马尔可夫过程。

1 随机矩阵

马尔可夫过程中用到了随机矩阵（stochastic matrix）的概念，在这里我们先对随机矩阵的代数性质进行一些探讨。

定义 1. （随机矩阵）一个 $r \times r$ 的矩阵 $Q = [q_{ij}]$ 如果满足：

1. $q_{ij} \geq 0$
2. $\sum_{j=1}^{r} q_{ij} = 1$

那么我们称矩阵 Q 为随机矩阵。

接下来，对于一个向量 v，如果 v 的每一个分量都大于等于 0，我们记 $v \geq 0$。随机矩阵满足以下性质：

定理 1. 以下命题是等价的：

1. 矩阵 Q 是随机矩阵
2. 对于任意的 $v \geq 0$，$Qv \geq 0$; 对于 $\iota = (1, 1, ..., 1)'$，$Q\iota = \iota$。
3. 如果 $v = (v_1, ..., v_r)$（行向量）是一个概率分布，即 $v_i \geq 0$ 且 $\sum_{i=1}^{r} v_i = 1$，那么 vQ 也是一个概率分布。

证明. 首先证明命题 1 可以推出命题 2。根据随机矩阵的定义，$(Qv)_i = \sum_{j=1}^{r} q_{ij} v_j$，可以验证命题 2 成立。

接下来证明命题 2 可以推出命题 3。如果我们令 ι_i 为第 i 个分量等于 1，其他分量等于 0 的列向量，那么 $(vQ)_i = vQ\iota_i$，由于 $\iota_i \geq 0$，从而 $Q\iota_i \geq 0$，从而 $vQ\iota_i \geq 0$；此外，$\sum_{i=1}^{r} (vQ)_i = vQ\iota = v'\iota = 1$，因而如果命题 2 成立，则命题 3 成立。

接下来验证如果命题 3 成立，则命题 1 成立。使用反证法，如果存在 i, j 使得 $q_{ij} < 0$，那么 $\iota_i' Q \iota_j < 0$，由于 ι_i 是一个概率分布，而 $\iota_j \geq 0$，从而 $\iota_i' Q$ 不是一个概率分布，与命题 3 矛盾，因而如果命题 3 成立，则必然有 $q_{ij} \geq 0$；由于 $v'Q$ 是一个概率分布，因而对于任意的概率分布 v，必然有 $\sum_{i=1}^{r} (vQ)_i = vQ\iota = 1$，从而 $Q\iota = \iota$。从而命题 1 成立。 □

以上的推理可以发现，对于一个随机矩阵 Q，由于 $Q\iota = \iota$，从而必然存在一个特征值等于 1。实际上，随机矩阵的所有特征值绝对值必然小于等于 1。对于特征方程：

$$Qv = \lambda v$$

对于其第 i 行，有：

$$\sum_{j=1}^{r} q_{ij} v_j = \lambda v_i$$

现在取 $k = \arg\max_i \{|v_i|\}$，有：

$$\begin{aligned}
|\lambda| \cdot |v_k| &= \left| \sum_{j=1}^{r} q_{kj} v_j \right| \\
&\leq \sum_{j=1}^{r} |q_{kj} v_j| \\
&= \sum_{j=1}^{r} q_{kj} |v_j| \\
&\leq \sum_{j=1}^{r} q_{kj} |v_k| \\
&= |v_k| \sum_{j=1}^{r} q_{kj} \\
&= |v_k|
\end{aligned}$$

从而 $|\lambda| \leq 1$。

此外，对于两个随机矩阵，我们有如下结论：

定理 2. 如果 $S = [s_{ij}], R = [r_{ij}]$ 为两个随机矩阵，那么矩阵 $Q = SR$ 也是一个随机矩阵。且如果对于所有的 i, j，$r_{ij} > 0$，那么 $q_{ij} > 0$。

证明. 由于：

$$q_{ij} = \sum_{k=1}^{r} s_{ik} r_{kj}$$

从而 $q_{ij}\geq 0$，且：

$$\sum_{j=1}^{r}q_{ij}=\sum_{j=1}^{r}\sum_{k=1}^{r}s_{ik}r_{kj}=\sum_{k=1}^{r}s_{ik}\left(\sum_{j=1}^{r}r_{kj}\right)=\sum_{k=1}^{r}s_{ik}=1$$

由于 $\sum_{k=1}^{r}s_{ik}=1$ 且 $s_{ik}\geq 0$，从而如果对于所有的 i,j，$r_{kj}>0$，必然有 $q_{ij}>0$。 □

此外，我们还可以将随机矩阵扩展到无限矩阵，即如果矩阵 $Q=[q_{ij}],1\leq i,j\leq\infty$，如果：

1. $q_{ij}\geq 0$
2. $\sum_{j=1}^{\infty}q_{ij}=1$

那么 Q 也称为随机矩阵。可以证明以上两个定理对于无限随机矩阵也成立。

2 马尔可夫链

现在考虑一个随机过程 $\{X_n,n=0,1,2,...\}$，每个 X_n 的取值范围为 S，我们称 S 为状态空间（state space），S 中的元素称为状态。如果 S 中只有有限个或者可数个状态时，不是一般性，我们可以对状态空间标号，并记 $S=\{1,2,...\}$。

对于一个随机过程 $\{X_n\}$，我们可以通过研究其有限维分布族研究其性质。现假设我们有一个初始概率分布 $p^{(0)}=(p_1,p_2,...)$（行向量）以及一系列随机矩阵 $Q(n)=[q_{ij}(n)]$，马尔可夫链可以如下定义：

定义 2.（马尔可夫链）对于有限或者可数的状态空间 S 以及初始概率分布 $p^{(0)}$ 以及随机矩阵 $Q(n),n=1,2,...$，如果对于 $j_i\in S,i\geq 0$，$\{X_n,n=0,1,2,...\}$ 满足：

$$P(X_0=j_0,X_1=j_1,...X_n=j_n)=p_{j_0}^{(0)}\cdot q_{j_0j_1}(1)\cdot\cdots\cdot q_{j_{n-1}j_n}(n)$$

那么我们称 $\{X_n,n=0,1,2,...\}$ 为**马尔可夫链**（**Morkov chain**），$q_{ij}(n)$ 称为**转移概率**（**transition probability**），$Q(n)$ 称为（一步）**概率转移矩阵**（**transition probability matrix**），或者转移矩阵。如果 $Q(1)=Q(2)=\cdots$，那么我们称该马尔可夫链为**时齐的马尔可夫链**（**time homogeneous Markov chain**）。

给定以上定义，注意到：

$$\begin{aligned}P(X_n=j_n|X_0=j_0,...,X_{n-1}=j_{n-1})&=\frac{P(X_0=j_0,X_1=j_1,...X_n=j_n)}{P(X_0=j_0,X_1=j_1,...X_{n-1}=j_{n-1})}\\&=q_{j_{n-1}j_n}(n)\\&=P(X_n=j_n|X_{n-1}=j_{n-1})\end{aligned}$$

因而该随机过程在第 n 时刻的状态只与第 $n-1$ 时刻的状态有关；只要给定第 $n-1$ 时刻的状态，第 n 时刻的状态与 $n-2$ 及之前的状态独立。该性质称为**马尔可夫性**（**Markov property**），或者无记忆性（memoryless）。

在接下来的讨论中，如无特殊说明，我们只讨论时齐的马尔可夫链。

例 1. （随机游走）一个质点在一维数轴上，其位置只能取整数值，从而状态空间 $S=\mathbb{N}$，质点初始位置为 X_0，当质点到达某个点 i 之后，以 p 的概率向右移动，以 $1-p$ 的概率向左移动，那么：

$$
\begin{aligned}
P\left(X_n=i+1|X_{n-1}=i\right)=p \\
P\left(X_n=i-1|X_{n-1}=i\right)=1-p
\end{aligned}
$$

是一个马尔可夫链。令 ϵ_n 以 p 的概率等于 1，以 $1-p$ 的概率等于 0，那么以上过程可以写为：

$$
X_n=X_0+\sum_{i=1}^{n}\epsilon_i
$$

例 2. （两端是吸收壁的随机游走）现在假设状态空间 $S=\{0,1,...,N\}$，当 X_n 处于状态 $1,2,...,n-1$ 时，起运动规律如上例；但是如果质点一旦到达 0 或者 N，该质点将永远停留在该点。此时，转移矩阵应为：

$$
Q=\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
1-p & 0 & p & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & 1-p & 0 & p & 0 & \cdots & 0 \\
0 & 0 & 1-p & 0 & p & \cdots & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1-p & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1
\end{bmatrix}
$$

例 3. （两端时反射壁的随机游走）同样假设状态空间 $S=\{0,1,...,N\}$，当 X_n 处于状态 $1,2,...,n-1$ 时，起运动规律如上例；但是如果质点一旦到达 0 或者 N，该质点将反弹到 1 和 $N-1$。此时，转移矩阵应为：

$$
Q=\begin{bmatrix}
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
1-p & 0 & p & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
0 & 1-p & 0 & p & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1-p & 0 & p & \cdots & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1-p & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & p \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0
\end{bmatrix}
$$

3 Chapman-Kolmogorov 方程

以上在定义马尔可夫链中我们讨论了一步概率转移矩阵，接下来我们讨论 k 步向前转移概率。

对于时齐的马尔可夫链 $\{X_n\}$，定义：

$$q_{ij}^{(k)} = P\left(X_{n+k} = j|X_n = i\right) = P\left(X_k = j|X_0 = i\right)$$

为 k 步转移概率，那么 k 步概率转移矩阵记为 $Q^{(k)} = \left[p_{ij}^{(k)}\right]$。为了计算 k 步转移概率，我们有如下定理：

定理 3. （*C-K* 方程）对于任意的 $m, n \geq 0$，有：

1. $p_{ij}^{(n+m)} = \sum_{k\in S} q_{ik}^{(n)} q_{kj}^{(m)}$
2. $Q^{(n+m)} = Q^{n+m}$

证明. 根据马尔可夫性：

$$\begin{aligned}
q_{ij}^{(n+m)} &= P\left(X_{n+m} = j|X_0 = i\right) \\
&= \sum_{k\in S} P\left(X_{n+m} = j|X_n = k\right) \cdot P\left(X_n = k|X_0 = i\right) \\
&= \sum_{k\in S} q_{ik}^{(n)} q_{kj}^{(m)}
\end{aligned}$$

注意到对于 $k \in S$，$q_{ik}^{(n)}$ 为 $Q^{(n)}$ 的第 i 行，$q_{kj}^{(m)}$ 为 $Q^{(n)}$ 的第 j 列，将其写为矩阵形式得到：

$$P^{(n+m)} = P^{(n)} P^{(m)}$$

迭代得到最终结果。 □

在马尔可夫过程中，如果初始概率，即 X_0 的概率分布为 $p^{(0)} = \left(p_1^{(0)}, p_2^{(0)}, \ldots\right)$（行向量），即 $P\left(X_0 = j\right) = p_j^{(0)}$，那么经过第一次转移之后：

$$p_j^{(1)} = P\left(X_1 = j\right) = \sum_{i\in S} p_i^{(0)} q_{ij} = \left[p^{(0)} Q\right]_j$$

同理，经过 n 步转移后：

$$p_j^{(n)} = P\left(X_1 = j\right) = \left[p^{(0)} Q^{(n)}\right]_j$$

4 极限理论

为了讨论马尔可夫链的极限分布，我们需要首先讨论状态的分类。

定义 3. （首达概率）对于任意的集合 $A \subset S$，定义随机变量：

$$T_A = \inf_n \{X_n \in A\}$$

为首达时间（**first passage time**，或者 **hitting time**）。注意 T_A 为一个停时。

接下来，对于 $i \in S$，我们将使用符号 $T_i = T_{\{i\}}$。另外，约定 $\inf \emptyset = \infty$。接下来我们可以定义常返状态：

定义 4. （常返性）当初始状态 $X_0 = i$ 时，如果状态 i 满足：

$$P(T_i < \infty) = 1$$

那么我们称状态 i 是常返的（**recurrent**），否则如果 $P(T_i < \infty) < 1$，则称该状态为非常返的，或者临时的（**transient**）。

因而，当且仅当：

$$f_{ii} = P(X_n = i\ 1 \leq n < \infty | X_0 = i) = 1$$

时，状态 i 是常返的。

如果状态 i 是非常返的，则意味着从 i 出发，有正的概率回不到状态 i，因而只能在状态 i 停留有限次。而如果状态 i 是常返的，则可以回到 i 无穷多次。

习题

参考文献

[1] Casella, G., Berger, R.L., 2002. Statistical inference. Duxbury Pacific Grove, CA.

[2] Shao, J., 2007. Mathematical Statistics, 2nd ed. Springer, New York.