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：

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

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：

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

像这样 $q_{ii}=1$ 的状态 i，称为吸收（absorbing）状态。

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 $Q^{(k)} = \left[q_{ij}^{(k)}\right]$。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. $q_{ij}^{(n+m)} = \sum_{k \in S} q_{ik}^{(n)} q_{kj}^{(m)}$
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：

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

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 常返性

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. （首达时间）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：

$$P(T_i < \infty | X_0 = i) = 1$$

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：

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

时，状态 i 是常返的。其中 f_{ii} 指在有限步能够回到状态 i 的概率。

例 4. 如果一个马尔可夫链的转移矩阵为：

$$\begin{bmatrix} 0.5 & 0.5 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

如果从状态 1 出发，不能在有限步回到状态 1 的概率为 $P(T_1 = \infty) = 0.5$，即当 $X_1 = 2$ 时，$T_1 = \infty$，从而状态 1 不是常返的。

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。

例 5. 在例 (2) 中，从状态 0 出发，那么质点将永远停留在 0 处，因而是常返状态；同理，N 也是常返状态。然而，从任何其他状态 i 开始，经过有限步以正的概率会被 $0, N$ 吸收从而回不到状态 i，从而其他状态都不是常返的。

例 6. 在例 (3) 中，从任何状态出发，都可以无穷多次回到该状态，因而每个状态都是常返的。

例 7. （井底之蛙）令状态空间 $S = \{1, 2, ...\}$，转移概率为：

$$\begin{cases} q_{i,i+1} = \alpha_i \\ q_{i,1} = 1 - \alpha_i \end{cases}$$

即在每个状态，青蛙都以 α_i 的概率向上跳，以 $1-\alpha_i$ 的概率回到底层。那么：

$$P(T_1 > r|X_0 = 1) = \alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_r$$

从而 $P(T_1 < \infty) = 1 - P(T_1 = \infty) = 1 - P(\forall r, T_1 > r) = 1 - \prod_{i=1}^{\infty}\alpha_i$，因而状态 1 是常返的意味着 $\prod_{i=1}^{\infty}\alpha_i = 0$，或者等价的，$\sum_{i=1}^{\infty}(1-\alpha_i) = \infty$。例如，当 $\alpha_i = 1 - \frac{1}{2i^2}$ 时，状态 1 是非常返的；而当 $\alpha_i = \alpha < 1$ 或者 $\alpha_i = 1 - \frac{1}{i}$ 时，状态 1 是常返的，意味着青蛙以 1 的概率在有限步以内掉回井底。

为了判断常返性，我们通常可以使用如下结论：

定理 4. 记

$$N_i = \sum_{n=1}^{\infty} 1\{X_n = i\}$$

为 i 的总访问次数，那么，当且仅当：

$$\mathbb{E}(N_i|X_0 = i) = \sum_{i=1}^{\infty} p_{ii}^{(n)} = \infty$$

时，状态 i 是常返的。

证明. 如果状态 i 是常返的，那么：

$$P(N_i = \infty|X_0 = i) = 1$$

从而 $\mathbb{E}(N_i|X_0 = i) = \infty$。如果状态 i 是非常返的，那么：

$$\mathbb{E}(N_i|X_0 = i) = \sum_{j=0}^{\infty} j \cdot f_{ii}^{j}(1 - f_{ii}) = \frac{f_{ii}}{1 - f_{ii}} < \infty$$

其中 $f_{ii} = P(T_i < \infty|X_0 = i)$ 为从 i 出发回到 i 的概率。进而根据单调收敛定理：

$$\mathbb{E}(N_i|X_0 = i) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{E}(1\{X_n = i\}|X_0 = i) = \sum_{i=1}^{\infty} p_{ii}^{(n)}$$

□

作为应用，我们可以使用以上定理研究简单随机游走的常返性。

例 8. （简单随机游走的常返性）对于例 (1) 中的简单随机游走，现在考虑 $i = 0$

的常返性。由于:

$$q_{00}^{(n)}=\begin{cases}0 & n\text{为奇数}\\ \left(\begin{array}{c}2k\\ k\end{array}\right)p^k(1-p)^k & n=2k\end{cases}$$

根据 Stirling 公式($n!\sim\sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n$):

$$\left(\begin{array}{c}2k\\ k\end{array}\right)=\frac{(2k)!}{k!k!}\sim\frac{\sqrt{4\pi k}\left(\frac{2k}{e}\right)^{2k}}{2\pi k\left(\frac{k}{e}\right)^{2k}}=\frac{4^k}{\sqrt{\pi}\sqrt{k}}$$

从而

$$q_{00}^{(2k)}\sim\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{[4p(1-p)]^k}{\sqrt{k}}$$

可知 $4p(1-p)\leq 1$,当且仅当 $p=0.5$ 时,$4p(1-p)=1$。当 $p\neq 0.5$ 时:

$$0\leq\sum_{k=1}^{\infty}q_{00}^{(2k)}=\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{[4p(1-p)]^k}{\sqrt{k}}\leq\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sum_{k=1}^{\infty}[4p(1-p)]^k<\infty$$

因而 $i=0$ 是非常返态。而当 $p=0.5$ 时:

$$\sum_{k=1}^{\infty}q_{00}^{(2k)}=\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{\sqrt{k}}\geq\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k}=\infty$$

从而此时 $i=0$ 是常返态。

以上结论还可以推广到多维的随机游走。比如,对于一个二维的随机游走,给定位置 (i,j),转移概率设为:

$$q_{(i,j),(i,j+1)}=q_{(i,j),(i,j-1)}=q_{(i,j),(i+1,j)}=q_{(i,j),(i-1,j)}=\frac{1}{4}$$

可以计算:

$$q_{(0,0),(0,0)}^{(2k)}\sim\frac{1}{\pi}\frac{1}{k}$$

因而 $(0,0)$ 也是常返的。然而,对于三维的随机游走:

$$q_{(0,0,0),(0,0,0)}^{(2k)}\sim\frac{1}{k^{\frac{3}{2}}}$$

从而 $\sum_{k=1}^{\infty}q_{00}^{(2k)}<\infty$,从而 $(0,0,0)$ 是非常返的。

而对于一个常返的状态,我们还可以定义正常返和零常返:

定义 5. (正常返和零常返)对于一个常返的状态 i,如果 $\mathbb{E}(T_i|X_0=i)=\infty$,则称该状态为零常返(**null recurrent**)的;如果 $\mathbb{E}(T_i|X_0=i)<\infty$,则称该

状态为正常返（positive recurrent）的。

例 9. 在例 (7) 中，可以计算：

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left(T_1|X_0=1\right) &= \left(1-\alpha_1\right)\cdot 1+\alpha_1\left(1-\alpha_2\right)\cdot 2+\alpha_1\alpha_2\left(1-\alpha_3\right)\cdot 3+\cdots \\
&= 1-\alpha_1+2\alpha_1-2\alpha_1\alpha_2+3\alpha_1\alpha_2-3\alpha_1\alpha_2\alpha_3+\cdots \\
&= 1+\alpha_1+\alpha_1\alpha_2+\alpha_1\alpha_2\alpha_3+\cdots
\end{aligned}
$$

如果 $\alpha_i=\alpha<1$，那么可知状态 1 是正常返的，且 $\mathbb{E}\left(T_1|X_0=1\right)=\frac{1}{1-\alpha}<\infty$，从而是正常返的。而如果 $\alpha_i=1-\frac{1}{c\cdot i}$，且 $c>1$，那么：

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left(T_1|X_0=1\right) &= \left(1-\alpha_1\right)\cdot 1+\alpha_1\left(1-\alpha_2\right)\cdot 2+\alpha_1\alpha_2\left(1-\alpha_3\right)\cdot 3+\cdots \\
&= \frac{1}{c}+\left(1-\frac{1}{c}\right)\frac{1}{c}+\left(1-\frac{1}{c}\right)\left(1-\frac{1}{2c}\right)\frac{1}{c}+\cdots \\
&= \frac{1}{c}\left[1+\left(1-\frac{1}{c}\right)+\left(1-\frac{1}{c}\right)\left(1-\frac{1}{2c}\right)+\cdots\right] \\
&= \frac{1}{c}\mathbb{E}\left(T_1|X_0=1\right)
\end{aligned}
$$

由于 $c>1$，且 $\mathbb{E}\left(T_1|X_0=1\right)\neq 0$，可见该序列发散，即 $\mathbb{E}\left(T_1|X_0=1\right)=\infty$，从而此时 1 是零常返的。

定义 6. 如果存在 $n\geq 1$，$p_{ij}^{(n)}>0$，那么我们称状态 i **通**（**leads to**）状态 j，记为 $i\to j$；如果 $i\to j$ 且 $j\to i$，则称状态 i 和 j **互通**（**communicate**）。

状态之间的相互通的关系是传递的，比如，如果 $i\to j$，$j\to k$，那么意味着存在 m,n，$p_{ij}^{(m)}>0,p_{jk}^{(n)}>0$，则 $p_{ik}^{(n+m)}\geq p_{ij}^{(n)}p_{jk}^{(m)}>0$，从而 $i\to k$。从而互通也是传递的。

定义 7. （不可约性）如果一个马尔可夫链的所有状态都是互通的，那么该马尔可夫链是不可约的（**irreducibility**）。

不可约性意味着从该马尔可夫链的任意状态出发，可以到达任意状态。

定理 5. 对于有限状态不可约的马尔可夫链，所有状态都是正常返的。

注意以上定理仅仅对于有限状态成立。对于无线状态，比如例 (7)，该马尔可夫链是不可约的，但是有可能不是常返的。

5 马尔可夫链的大数定律

有了常返性之后，我们可以得到所谓的「强马尔科夫性」，该性质意味着从状态 i 出发，每一次回到状态 i，相当于马尔可夫链重新开始。

定理 6. （强马尔可夫性）对于任意的状态 $i \in S$ 以及初始分布 $p^{(0)}$，对于任意的 $k < \infty$ 以及 $a_1, ..., a_k \in S$，有：

$$P\left(X_{T_i+j} = a_j, j = 1, 2, ..., k, T_i < \infty\right) = P\left(X_j = a_j, j = 1, 2, ..., k | X_0 = i\right) \cdot P\left(T_i < \infty\right)$$

证明. 对于任意 $n \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} P\left(X_{T_i+j} = a_j, 1 \leq j \leq k, T_i = n\right) &= P\left(X_{T_i+j} = a_j, 1 \leq j \leq k, X_n = i, X_r \neq i, 1 \leq r \leq n-1\right) \\ &= P\left(X_{T_i+j} = a_j, 1 \leq j \leq k | X_n = i, X_r \neq i, 1 \leq r \leq n-1\right) \\ &\cdot P\left(X_n = i, X_r \neq i, 1 \leq r \leq n-1\right) \\ &= P\left(X_j = a_j, 1 \leq j \leq k | X_0 = i\right) \cdot P\left(T_i = n\right) \end{aligned}$$

对于有限的 n，两边分别相加得到最终结果。 □

有了强马尔可夫性以后，我们可以将马尔可夫链分解为一系列的独立同分布的周期。

定义 8. （i.i.d 循环）令 $i \in S$，以及 $T_i^{(0)} = 0$，定义：

$$T_i^{(k+1)} = \begin{cases} \inf\left\{n : n > T_i^{(k)}, X_n = i\right\} & if\ T_i^{(k)} < \infty \\ \infty & if\ T_i^{(k)} = \infty \end{cases}$$

即 $T_i^{(k)}$ 为第 k 次回到状态 i 的时间。令 $\eta_r = \left\{X_j : T_i^{(r)} \leq j \leq T_i^{(r+1)} - 1; T_i^{(r+1)} - T_i^{(r)}\right\}$，即第 r 次与 $r+1$ 次回到状态 i 之间的所有状态，以及间隔时间，我们称 η_r 为一个循环（**cycles** 或者 **excursions**）。注意 η_r 的元素个数是随机的，依赖于相邻两次回到状态 i 的时间长度。

使用以上概念，我们可以导出一个简单的大数定律：

定理 7. 令 i 为一个正常返的状态，定义：

$$N_n(j) = \#\left\{k : 0 \leq k \leq n, X_k = j\right\}, j \in S$$

即在 n 步以内到达 j 的次数；同时定义

$$L_n(j) = \frac{N_n(j)}{n+1}$$

那么如果 $X_0 = i$，有：

$$L_n(j) \overset{a.s.}{\to} \frac{V_{ij}}{\mathbb{E}\left(T_i | X_0 = i\right)}$$

其中：

$$V_{ij} = \mathbb{E}\left(\sum_{k=0}^{T_i-1} 1\left\{X_k = j\right\} | X_0 = i\right)$$

即在 $k=0,1,...,T_i-1$ 时间范围内，从 i 出发到达 j 的平均次数。特别的，

$$L_n(i) \overset{a.s.}{\to} \frac{1}{\mathbb{E}(T_i|X_0=i)}$$

证明. 对于任意的 n，令 $k=k(n)$ 满足：$T_i^{(k)} \le n \le T_i^{(k+1)}$，那么：

$$N_{T_i^{(k)}} \le N_n(j) \le N_{T_i^{(k+1)}}$$

现在令 $\xi_r = \#\left\{l : T_i^{(r)} \le l \le T_i^{(r+1)}, X_l = j\right\}$，即第 r 个循环中 j 出现的次数，从而 $N_{T_i^{(k)}} = \sum_{r=0}^{k} \xi_r$，从而：

$$\sum_{r=0}^{k} \xi_r \le N_n(j) \le \sum_{r=0}^{k+1} \xi_r$$

由于 $V_{ij} = \mathbb{E}(\xi_1|X_0=i) \le \mathbb{E}(T_i|X_0=i) < \infty$，从而根据强大数定律，有：

$$\frac{1}{k(n)} \sum_{r=0}^{k} \xi_r \overset{\text{a.s.}}{\to} \mathbb{E}(\xi_1|X_0=i) = V_{ij}$$

以及：

$$\frac{1}{k(n)} T_i^{(k)} \overset{\text{a.s.}}{\to} \mathbb{E}(T_i|X_0=i)$$

由于 $T_i^{(k)} \le n \le T_i^{(k+1)}$，从而

$$\frac{n}{k(n)} \overset{\text{a.s.}}{\to} \mathbb{E}(T_i|X_0=i)$$

由于：

$$\frac{k(n)}{n} \frac{N_{T_i^{(k)}}}{k(n)} \le \frac{N_n(j)}{n} \le \frac{N_{T_i^{(k+1)}}}{n} = \frac{N_{T_i^{(k+1)}}}{k(n)+1} \frac{k(n)+1}{n}$$

从而：

$$L_n(j) \overset{\text{a.s.}}{\to} \frac{\mathbb{E}(\xi_1|X_0=i)}{\mathbb{E}(T_i|X_0=i)}$$

□

注意以上结论对于任意的使得 $P(T_i < \infty)$ 的初始分布都是成立的，从而只要保证在某一个初始分布下，$P(T_i < \infty)$，那么 $L_n(j)$ 的极限与初始分布无关。

以上的结论可以用来判断非常返、常返、正常返和零常返状态：

定理 8. 对于一个状态 i：

1. i 是非常返的 $\Leftrightarrow$ 对于任意的初始分布 $\lim_{n\to\infty} N_n(i) < \infty \Leftrightarrow$

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{E}\left(N_n(i)\,|X_0 = i\right) = \sum_{k=0}^{\infty} p_{ii}^{(k)} < \infty$$

2. i 是零常返的 $\Leftrightarrow \sum_{k=0}^{\infty} p_{ii}^{(k)} = \infty$ 且:

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{E}\left(L_n(i)\,|X_0 = i\right) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n} p_{ii}^{(k)} = 0$$

3. i 是正常返的 $\Leftrightarrow$

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{E}\left(L_n(i)\,|X_0 = i\right) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n} p_{ii}^{(k)} > 0$$

4. 如果一个马尔可夫链时不可约的，且一个状态 i 是正常返的，那么对于任意的状态 j 和初始分布：

$$L_n(j) \xrightarrow{a.s.} \frac{1}{\mathbb{E}\left(T_j|X_0 = j\right)}$$

例 10. 对于一维简单随机游走，由于 $p_{00}^{(2k)} \sim \frac{c}{\sqrt{k}}$，$k \to \infty$，从而：

$$\sum_{n=0}^{\infty} p_{00}^{(n)} = \infty$$
$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n} p_{00}^{(k)} \to 0$$

从而状态 0 是零常返的。

定理（7）还可以进一步扩展，使其包含零常返的状态：

定理 9. 令 i 为一个常返的状态，对于任意状态 j 以及使得 $P\left(T_i < \infty\right) = 1$ 的初始分布，有：

$$L_n(j) \xrightarrow{a.s.} \frac{V_{ij}}{\mathbb{E}\left(T_i|X_0 = i\right)} \triangleq \pi_{ij}$$

其中 $V_{ij} < \infty$，若 $\mathbb{E}\left(T_i|X_0 = i\right) = \infty$，则 $\pi_{ij} = 0$。

推论 1. 对于一个不可约的马尔可夫链，且至少有一个常返的状态，那么：

$$L_n(j) \xrightarrow{a.s.} c_j = \frac{1}{\mathbb{E}\left(T_j|X_0 = j\right)}$$

如果 $\mathbb{E}\left(T_j|X_0 = j\right) = \infty$，那么 $c_j = 0$。

6 极限分布

接下来我们讨论马尔可夫链的极限分布问题。

定义 9. （平稳分布）令状态 i 为正常返状态，如果对于 $j \in S$，$\sum_j \pi_j = 1$ 且对于所有的 $j \in S$

$$\sum_{l \in S} \pi_l q_{lj} = \pi_j$$

那么我们称 $\pi = (\pi_l), l \in S$ 为**平稳分布**（**stationary distribution**）或者**不变分布**（**invariant distribution**）。

实际上，对于有限状态马尔可夫链来说，平稳分布需满足：

$$\pi Q = \pi$$

即经过一步转移矩阵的转移之后，状态的分布仍然是不变的。

定理 10. 对于一个不可约的马尔可夫链，假设至少有一个状态是正常返的，那么：

1. 所有的状态都是正常返的；

2. $\pi = [\pi_j]$ 为一个平稳分布，其中：

$$\pi_j = \frac{1}{\mathbb{E}\left(T_j | X_0 = j\right)}$$

3. 对于任意的初始状态，以及任意的状态 j，有：

   (a) 令：

$$\frac{1}{n+1} \sum_{k=0}^{n} P\left(X_k = \mu\right) \to \pi_j$$

   则 $\pi = [\pi_j]$ 为唯一的极限分布，同时也是平稳分布

   (b) $L_n(j) \overset{a.s.}{\to} \pi_j$。

然而以上定理仍然是在平均的意义下，一个自然的问题是，以上的平均符号是否可以去掉，即是否有：

$$\lim_{n \to \infty} P\left(X_n = i\right) = \pi_i$$

成立。为了达到这一结果，我们必须排除所谓的“周期性”。

定义 10. 对于任意的状态 i，其周期（**period**）为：

$$d_i \triangleq g.c.d \left\{ n : n \geq 1, p_{ii}^{(n)} > 0 \right\}$$

此外，如果 $d_i = 1$，则称状态 i 为**非周期**（**aperiodic**）的。

例 11. 对于一个马尔可夫链，其转移矩阵:“

$$Q = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

可知对于任意一个状态，起周期 $d_i = 2$。

定义 11. 如果一个状态 i 时正常返的、非周期的，那么我们称该状态为**遍历的**（**ergodic**）。在一个不可约的马尔可夫链中，如果所有的状态都是遍历的，那么我们称这个马尔可夫链为遍历的。

定理 11. （遍历性定理）对于一个遍历的马尔可夫链，对于任意的初始分布，极限:

$$\lim_{n\to\infty} P(X_n = i) = \pi_i$$

存在且 $\pi = [\pi_i]$ 为唯一的平稳分布。

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.