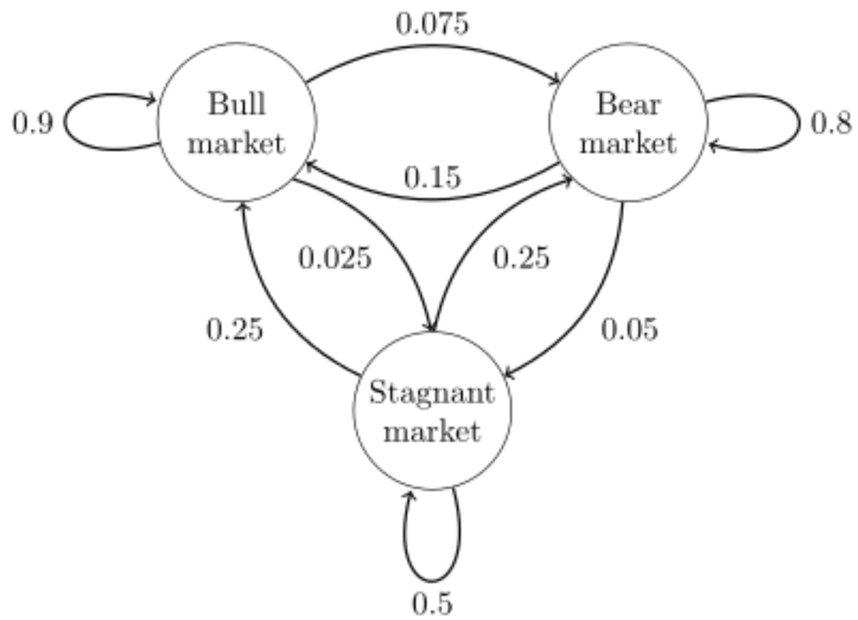
在MCMC之蒙特卡罗方法之中，讲到如何利用蒙特卡罗方法来随机模拟求解一些复杂的连续积分或者离散求和方法。但蒙特卡罗方法需要得到对应的概率分布的样本集，而对于某些概率分布，得到这样的样本集很困难，因此本篇我们将介绍马尔可夫链来解决这种问题。

1.马尔可夫链简介

马尔可夫链定义比较简单，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，这样可以很大程度上简化模型的复杂度。假设我们的序列状态为$\ldots, X_{t-2}, X_{t-1}, X_t, X_{t+1}, \ldots$，那么我们在时刻$X_{t+1}$状态的条件概率仅仅依赖于$X_t$，即

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

因为某一时刻状态转移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移概率，进而得到状态转移概率矩阵，那么马尔科夫链的模型便定了。以下图股市模型为例，共有三个状态，分别为牛市(Bull market)、熊市(Bear market)、横盘(Stagnant market)。每一个状态都能够以一定概率转移到下一状态，比如牛市以0.075的概率转移到横盘的概率，这些状态转移概率图可以转换为矩阵的形式进行表示。



如果我们定义矩阵P某一位置$P(i, j)$的值为$P(j|i)$，即从状态i转移到状态j的概率，并定义牛市的状态为0、熊市状态为1、横盘状态为2，这样便得到马尔可夫链模型的状态转移矩阵。

$$\begin{bmatrix} 0.9 & 0.075 & 0.025 \\ 0.15 & 0.8 & 0.05 \\ 0.25 & 0.25 & 0.5 \end{bmatrix}$$

那么马尔科夫链模型的状态转移矩阵和蒙特卡罗方法所需要的概率分布样本集有什么关系呢?

2.马尔可夫链状态转移矩阵性质

得到马尔可夫链状态转移矩阵，我们看看马尔可夫链模型状态转移矩阵的性质。仍以上面的状态转移矩阵为例，假设当前股市的概率分布为[0.3, 0.4, 0.3]，即30%概率的牛市、40%概率的熊市、30%概率的横盘。如果以这个状态作为序列概率分布的初始状态t0，与状态转移矩阵计算得到t1,t2,t3,...时刻的概率，相应代码和结果如下。

```
import numpy as np


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


if __name__ == '__main__':
    markov_chain()
```

```
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: 61
[[0.625  0.3125 0.0625]]
Current round: 62
[[0.625  0.3125 0.0625]]
...
...
Current round: 98
[[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，状态转移矩阵的概率分布就不变了，一直保持在[0.625, 0.3125, 0.0625]，即62.5%的概率的牛市、31.25%概率的熊市、6.25%概率的横盘，那么这个是巧合吗?

答案并不是巧合，如果我们换一个初始概率分布t0，比如以[0.7, 0.1, 0.2]作为初始概率分布，然后带入状态转移矩阵得到t1,t2,t3,...时刻的概率，会发现得到同样的结果。即最终的状态概率分布会趋于同一个稳定概率分布[0.625, 0.3125, 0.0625]，也就是说，马尔可夫链的状态转移矩阵收敛到稳定概率分布与初始状态概率分布无关。

上述结果是一个非常好的形式，比如我们得到了稳定概率分布所对应的马尔可夫链模型的状态转移矩阵，那么可以用任意的概率分布样本开始，带入马尔可夫链状态转移矩阵，然后就可以得到符合对应稳定概率分布的样本。这个性质不光对于上面的状态转移矩阵有效，对于绝大多数的其他马尔可夫链模型的状态转移矩阵也有效。同时不光是离散状态，连续状态情况下也成立。

同时，对于一个确定的状态转移矩阵P，它的n次幂P^n也是可以确定的。同样以上述矩阵为例，代码和结果如下所示。可以发现，在n>6时，P^n的值稳定不在变化，而且每一行都为[0.625, 0.3125, 0.0625]，这和前面提到的稳定分布形式是一样的。同样这个性质不光在离散状态下成立，连续状态时也成立。

```
import numpy as np


def markov_chain():
    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


if __name__ == '__main__':
    markov_chain()
```

```
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: 10
[[0.625   0.3125 0.0625]
 [0.625   0.3125 0.0625]
 [0.625   0.3125 0.0625]]
```

下面用数学语言总结下马尔可夫链的收敛性质，如果一个非周期的马尔可夫链有状态转移矩阵P，并且他的任意两个状态是连通的，那么$lim_{n\to\infty}P_{ij}^n$与i无关。我们可以得到

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

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

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

- π是方程$\pi P = \pi$的唯一非负解，π称为马尔可夫链的平稳分布，其中

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

上面性质中，有几点需要特意说明

- 非周期的马尔可夫链：主要是指马尔可夫链的状态转换不是循环的，如果是循环的则永远不会收敛。幸运的是我们遇到的马尔可夫链一般都是非周期的，用数学方式表达即为：对于任意某一状态i，d为集合$\{n|n \geq 1, p_{i,i} > 0\}$的最大公约数，如果d=1，则该状态为非周期的。
- 任意两个状态是连通：即从任意一个状态可以通过有线步到达其他的任意一个状态，不会出现条件概率为0导致不可达的情况。
- 马尔可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。
- π通常称为马尔可夫链的平稳分布。

3.基于马尔可夫链采样

如果我们得到某个平稳分布所对应的马尔可夫链状态转移矩阵，那么很容易采样出这个平稳分布的样本集。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，然后基于条件概率分布$P(x|x_0)$采样状态值x_1，一直进行下去，当状态转移进行到一定次数时，比如到n次时，认为此时的采样集$(x_n, x_{n+1}, x_{n_2}, \ldots)$即是符合我们的平稳分布的对应样本集，便可以用来做蒙特卡罗模拟求和了。基于马尔可夫链的采样过程如下：

- 输入马尔可夫链状态转移矩阵P，设定状态转移次数阈值n_1，需要的样本个数n_2。
- 从任意简单概率分布(比如均匀分布)采样得到初始状态值x_0。
- for t = 0 to n1 + n2 - 1：从条件概率分布$P(x|x_t)$中采样得到样本x_{t+1}。

样本集$(x_{n1}, x_{n1+1}, \ldots, x_{n1+n2-1})$即为我们需要的平稳分布所对应的样本集。

4.马尔可夫链总结

如果假定我们可以得到所需要采样样本的平稳分布所对应的马尔可夫链状态转移矩阵，那么我们就可以用马尔可夫链采样得到我们需要的样本集，进而进行蒙特卡罗模拟。但是现在还有个很重要的问题，随意给定一个平稳分布π，如何得到它所对应的马尔可夫链状态转移矩阵P呢？下篇文章，我们将重点介绍MCMC采用通过与会的方式解决上述问题，以及改进版的M-H采样和Gibbs采样。

5.推广

更多内容请关注公众号**谓之小一**，若有疑问可在公众号后台提问，随时回答，欢迎关注，内容转载请注明出处。

长按关注微信公众号