标题 **title**

作者 *author*

2024 年 8 月 9 日

前言

目录

第一部分

AI 的逻辑

第二章　Markov 链与决策

我们都知道，人的推理和决策会受到时间的影响：我们宁愿要现在的十块钱也不要十年后的二十块钱。然而，人和人的耐心程度是不一样的。2010 年，来自意大利博洛尼亚大学 Manuela Sellitto 和她的同事进行了一项实验. 他们的实验对象是一组大脑正常的人（对照组）、一组非眶额叶区受损的病人（实验组 1）和一组眶额叶周围受损的病人（实验组 2）。实验人员对被试进行提问，典型的问题如下：“你想要现在拿到 10 美元还是一个月后拿到 12 美元?”。他们对食物和货币形式的奖励都进行了测试。

结果显示，眶额叶周围受损的病人更倾向于选择即时的奖励，而其他组的人更倾向于选择未来的奖励。如果货币奖励翻倍（例如，从 50 美元变为 100 美元），对照组和实验组 1 的人愿意等待 4 到 6 个月，而眶额叶周围受损的人（实验组 2）甚至不愿意等待 3 周。换句话说，人的耐心程度是大脑结构决定的，而不是自己可以轻易改变的！

以上例子不仅说明时间在决策中的重要性，更说明人脑中有特殊的结构和机制处理时间相关的决策问题。这样的观察对于人工智能也是同样重要的。本章我们将介绍 Markov 链，这是一种带有时间的概率模型，它是应用最为成功的含时决策模型之一。我们还将介绍人工智能领域基于 Markov 链的各种应用，包括 Markov 决策模型与强化学习、隐 Markov 模型以及扩散模型。

§2.1　Markov 链

在第一章中，我们说明了合情推理是人和 AI 非常重要的推理方式，这一推理模式基于 Bayes 概率论和似然。然而，这一模型对推理的假设是逻辑的、静态的，时间的概念并不出现在似然里面. 例如，考虑一个罐子，里面有除颜色之外不可区分的 N 个球，有 n 个白球，剩下的是黑球. 顺序从中拿出 N 个球，第 k 次拿出的球颜色是 W_k 或 B_k.

用 Bayes 定理很容易证明，对任意 $i \neq j$，$\Pr(W_i|W_j) = \Pr(W_j|W_i)$. 也就是说，$\Pr(W_i|W_j)$ 和 $\Pr(W_j|W_i)$ 不仅是可计算的，而且是相等的. 然而，如果从推理的角度来说，我们基于时间更晚的状态推理时间更早的状态，这样的推理需要我们能够有对未来

的模型。因此，我们需要引入一个带有时间的推理模型，这就是 Markov 链.

定义 2.1 (Markov 链) **Markov 链**（**马氏链**）是一个随机变量序列 $\{X_t\}_{t=0}^{\infty}$. 包含如下概念：

- *状态空间* $\mathcal{S}$：X_t 所有可能值构成的集合，有限或者可数.
- *转移矩阵* $\mathcal{P}$（*转移核*）：下一时刻系统状态之间转移的概率. $\mathcal{P} = (p_{ij})_{i,j\in\mathcal{S}}$，$p_{ij}$ 是从 i 状态转移到 j 状态的概率.
- *Markov 性*: 对任意时刻 $t = 1, \ldots, n$ 和任意状态 $j, k, j_0, \ldots, j_{t-1} \in \mathcal{S}$，如下等式成立

$$\Pr(X_{t+1} = j | X_t = k, X_{t-1} = j_{t-1}, \ldots, X_0 = j_0) = \Pr(X_{t+1} = j | X_t = k) = p_{kj}.$$

有时候也会考虑带初态的 Markov 链，此时 X_0 服从分布 $\lambda = (\lambda_s)_{s\in\mathcal{S}}$.

我们给出的定义是简化的 Markov 链，每个时刻之间的转移都是一样的转移矩阵，这样的 Markov 链被称为*时齐的*. 有时候也会考虑非时齐的 Markov 链（例如扩散模型），即每个时刻之间的转移矩阵不一样，这样的 Markov 链被称为*非时齐的*，此时 t 时刻的转移矩阵是 $\mathcal{P}^{(t)}$，定义中 Markov 性的转移概率是 $p_{kj}^{(t)}$.

Markov 链是一种简化的带时间的概率模型，它最重要的性质是 Markov 性，即在固定现在的情况下，过去与未来相互独立. 这一性质的数学表述为：

命题 2.1 (Markov 性) *条件在 $X_n = i$ 下，$\{Y_m\}_{m=0}^{\infty} := \{X_{m+n}\}_{m=0}^{\infty}$ 是一个转移矩阵为 P 的 Markov 链，并且与 $(X_0, \ldots, X_{n-1})$ 相互独立.*

证明留做习题.

我们考虑的 Markov 链还有时齐性，即状态的转移不依赖当前时间，只和当前的状态有关. 时齐性的数学表述为：

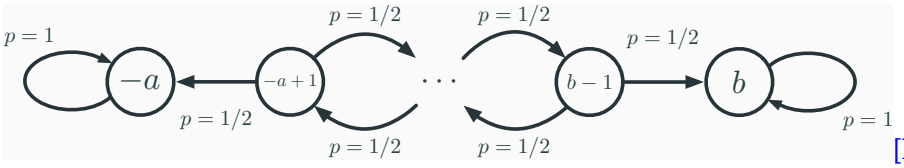
命题 2.2 *设 $\{X_t\}_{t=0}^{\infty}$ 是一个 Markov 链，那么对任意的 $t, m, n \in \mathbb{N}$ 和 $i, j, k \in \mathcal{S}$，有* $\Pr(X_{m+n} = j | X_n = k) = \Pr(X_m = j | X_0 = k)$.

我们来看一个 Markov 链的例子.

例 2.1 (赌徒模型) 考虑公平对赌. 玩家 A 和 B 抛硬币来赌钱，A 赌正面，B 赌反面. 每一轮独立地抛硬币，正面朝上的概率和反面朝上的概率相等，都是 $1/2$. 赢的一方给输的一方一块钱. A 输 a 块钱破产，B 输 b 块钱破产，Z_i 是第 i 轮 A 的收入. $Z_0 = X_0 = 0$ 是 A 初始的收入. $X_n = Z_0 + \cdots + Z_n$ 是 A 的累计收入. 那么，$\{X_n\}_{n\geq 0}$ 是一个 Markov 链.

- 状态空间：$\mathcal{S} = \{-a, -a+1, \ldots, 0, 1, \ldots, b\}$.
- 转移概率：对 $-a < i < b-1$，$p_{i,i+1} = p_{i+1,i} = 1/2$；$p_{-a+1,-a} = p_{b-1,b} = 1/2$，$p_{-a,-a} = p_{b,b} = 1$；其他值为 0.

转移矩阵可以画成图 2.1所示的形式.



[lhy: TODO：改图]

图 2.1: 赌徒模型的转移矩阵

接下来，我们来看一个非时齐的 Markov 链的例子.

例 2.2 (Pólya 的坛子) 想象现在有一个坛子. 开始的时候，坛子里有 1 个白球和 1 个黑球. 每一轮，我们从坛子里拿出一个球，观察颜色，然后放回去，再加入一个和刚才拿出的球颜色相同的球. 例如，如果第一轮我们拿出一个白球，那么第二轮开始时坛子里有 2 个白球和 1 个黑球.

设 X_t 是第 t 轮之后白球的数量，我们会发现，它是一个非时齐的 Markov 链，转移概率为

- $\Pr(X_{t+1} = i+1 | X_t = i) = i/(t+2)$,
- $\Pr(X_{t+1} = i | X_t = i) = (t+1-i)/(t+2)$,
- 其他值的概率为 0。

这个 Markov 链的一个重要性质是当 $t \to \infty$ 时，X_t/t 趋于均匀分布 $\mathcal{U}[0,1]$.

这个性质可以通过对 t 进行归纳证明，即 X_t 是 $\{1, \ldots, t+1\}$ 上的均匀分布. $t = 0$ 时，$X_0 = 1$，显然成立. 假设对 t 成立，即 X_t 是 $\{1, \ldots, t+1\}$ 上的均匀分布. 那么对 $t+1$ 以及 $1 \le j \le t+2$，根据全概率公式，我们有

$$\begin{aligned}
\Pr(X_{t+1} = j) &= \sum_{k=1}^{t+1} \Pr(X_{t+1} = j | X_t = k) \Pr(X_t = k) \\
&= \frac{1}{t+1} (\Pr(X_{t+1} = j | X_t = j-1) + \Pr(X_{t+1} = j | X_t = j)) \\
&= \frac{1}{t+1} \left(\frac{j-1}{t+2} + \frac{t+2-j}{t+2} \right) = \frac{1}{t+2}.
\end{aligned}$$

于是，归纳成立.

Pólya 的坛子还有一种有趣的解读：如果我们把人生的每一次选择都看成放球，我们经常会基于现在好的东西（看到的黑球还是白球）投资自己的人生（放一个黑球还是白球），这样的结果是我们的人生会多姿多彩，百花齐放。

我们回到赌徒模型。A 的累计收入 $\{X_n\}_{n\geq 0}$ 形成了 Markov 链. 根据 Markov 性，未来双方的收入变化只取决于现在，而和过去运气无关. 与之相关的一个现象是赌徒谬误，即认为过去的运气会影响未来的运气. 例如，如果一个人连续输了很多次，那么他会认为自己未来运气会变好，赢的概率更大. 但是，根据 Markov 性，过去的运气不会影响未来的运气，因此这种想法是错误的. “风水轮流转” 在一场公平对赌中是不正确的认知. 那么，如何评估赌局的公平性?

如果对赌是公平的，那么我们应该认为两个人每一轮的累计收入分布都是一样的，即

$$\Pr(X_n = i | X_0 = 0) = \Pr(X_n = -i | X_0 = 0).$$

因此，我们需要能够计算多步转移的概率. 设 $p_{ij}^{(k)}$ 表示从状态 i 用 k 步转移到状态 j 的概率. k 步转移概率形成了一个矩阵 $\mathcal{P}^{(k)}$. 下面的定理给出了计算*多步转移概率*的方法.

定理 2.1 (Kolmogorov-Chapman 方程) $P^{(k+l)} = \mathcal{P}^{(k)}\mathcal{P}^{(l)}$.

证明. 由 Markov 性、时齐性和全概率公式，

$$\begin{aligned} p_{ij}^{(k+l)} &= \Pr(X_{k+l} = j | X_0 = i) \\ &= \sum_{\alpha} \Pr(X_{k+l} = j, X_k = \alpha | X_0 = i) \\ &= \sum_{\alpha} \Pr(X_k = \alpha | X_0 = i) \Pr(X_{k+l} = j | X_k = \alpha) \\ &= \sum_{\alpha} p_{i\alpha}^{(k)} p_{\alpha j}^{(l)}. \end{aligned}$$

□

Kolmogorov-Chapman 方程有两个重要的特例，前向方程：$\mathcal{P}^{(k+1)} = \mathcal{P}^{(k)}\mathcal{P}$，以及后向方程：$\mathcal{P}^{(l+1)} = \mathcal{P}\mathcal{P}^{(l)}$. 见图 2.2 和图 2.3.

此外，利用归纳法，我们还有如下推论：

推论 2.1 $\mathcal{P}^{(k)} = \mathcal{P}^k$.

若已知初始分布向量为 λ，利用这一推论，我们可以计算它随时间的演化：

$$\lambda^{\mathsf{T}}, \lambda^{\mathsf{T}}\mathcal{P}, \ldots, \lambda^{\mathsf{T}}\mathcal{P}^n, \ldots$$

[lhy: TODO: 重 画]

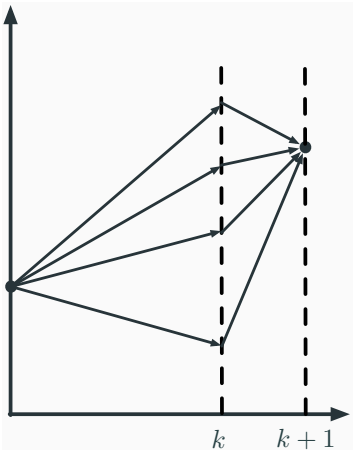


图 2.2: 前向方程（往前一步）

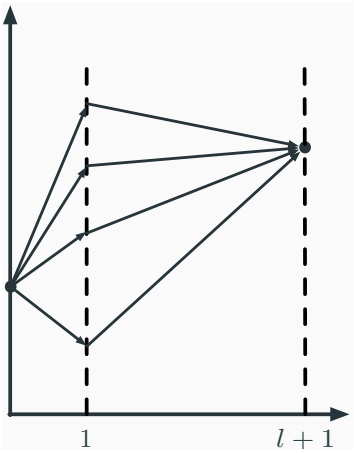


图 2.3: 后向方程（往回一步）

回到赌徒模型，如何计算公平对赌中 X_n 的概率分布？我们先来看一个简化的例子. 考虑只有两个状态 0,1，转移矩阵为

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} \\ p_{10} & p_{11} \end{pmatrix}.$$

或者画成图 2.4 的形式.

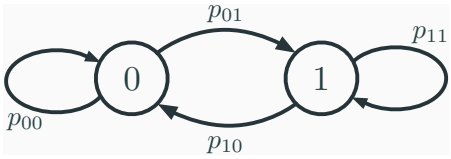


图 2.4: 只有两个状态的 Markov 链

可以归纳证明：

$$\begin{aligned}\mathcal{P}^n =& \frac{1}{2-p_{00}-p_{11}}\begin{pmatrix}1-p_{11} & 1-p_{00}\\ 1-p_{11} & 1-p_{00}\end{pmatrix}\\ &+\frac{(p_{00}+p_{11}-1)^n}{2-p_{00}-p_{11}}\begin{pmatrix}1-p_{00} & -(1-p_{00})\\ -(1-p_{11}) & 1-p_{11}\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

假设 $|p_{00}+p_{11}-1|<1$，等价地，p_{00} 和 p_{11} 不同时为 0 或同时为 1，那么

- $\lim_{n\to\infty} p_{i0}^{(n)} = (1-p_{11})/(2-p_{00}-p_{11})$，
- $\lim_{n\to\infty} p_{i1}^{(n)} = (1-p_{00})/(2-p_{00}-p_{11})$.

因此，无论初始分布是什么，随着时间的推移，Markov 链的分布会收敛到一个同一个稳定的分布. 这个例子是否具有普遍性?

我们再考虑一个例子. 一个六元环 $\mathbb{Z}_6=\{0,1,2,3,4,5\}$ 上的 Markov 链 X_k，转移矩阵为 $p(i,i+1)=p(i,i-1)=1/2$，这里的表达式将 -1 和 5 等同，6 和 0 等同. 如果初始分布集中在 0 上，那么我们会发现以概率 1 有 $X_{2k}\in\{0,2,4\}$，$X_{2k+1}\in\{1,3,5\}$。这种情况下，最终不会趋于一个稳定的分布！如果初始分布等概率地分布在 $\{0,1\}$ 上，最终会趋于一个 $\mathbb{Z}_6$ 上的均匀分布. 因此，并不是所有 Markov 链都具有这样的性质. 然而，对于相当广泛的一类 Markov 链，这一结论成立，这就是*遍历定理*.

定理 2.2 (遍历定理) *设 Markov 链的状态空间为 $\mathcal{S}=\{1,\dots,N\}$，转移矩阵为 $\mathcal{P}=(p_{ij})$. 如果对于某一个 n_0 有*

$$\min_{ij} p_{ij}^{(n_0)} > 0, \tag{2.1}$$

那么存在分布 $\lambda=(\lambda_1,\dots,\lambda_N)$ 使得

$$\lambda_i>0,\quad \sum_i \lambda_i = 1, \tag{2.2}$$

并且对于每一个 $j\in\mathcal{S}$ 和任意 $i\in\mathcal{S}$ 都有

$$p_{ij}^{(n)} \to \lambda_j, n\to\infty. \tag{2.3}$$

反之，如果存在满足 (2.2) 和 (2.3) 的 λ，则存在满足 (2.1) 的 n_0.

最后，在以上条件下，(2.2) 的 λ 满足

$$\lambda^{\mathsf{T}} = \lambda^{\mathsf{T}}\mathcal{P}. \tag{2.4}$$

条件 (2.1) 表明超过某个步数 n_0 之后，从 i 出发到达 j 的概率总是正的，这个条件被称为*遍历*. 条件 (2.2) 表明每一个状态被访问到的概率都是正的，没有 “死状态”. 遍历定理表明遍历的 Markov 链从任何状态出发都是不可逆的，最终会把每个状态都走过一遍（遍历），变成一个混合均匀的状态. 这可以用来解释物理学中的扩散现象，也是扩散模型的基础.

下面我们证明遍历定理.

证明. 首先证明从 (2.1) 到 (2.2) 和 (2.3) 的过程. 定义序列

$$m_j^{(n)} = \min_i p_{ij}^{(n)}, \quad M_j^{(n)} = \max_i p_{ij}^{(n)}.$$

我们先证明这两个序列是单调的。由于

$$p_{ij}^{(n+1)} = \sum_\alpha p_{i\alpha} p_{\alpha j}^{(n)},$$

可见

$$m_j^{(n+1)} = \min_i p_{ij}^{(n+1)} \geq \min_i \sum_\alpha p_{i\alpha} \min_\alpha p_{\alpha j}^{(n)} = m_j^{(n)},$$

因此 $m_j^{(n)} \leq m_j^{(n+1)}$。

类似地 $M_j^{(n)} \geq M_j^{(n+1)}$。

接下来我们说明，$M_j^{(n)} - m_j^{(n)}$ 会趋于零。设 $\varepsilon = \min_{i,j} p_{ij}^{(n_0)} > 0$，由 Kolmogorov-Chapman 方程可得

$$\begin{aligned} p_{ij}^{(n_0+n)} &= \sum_\alpha p_{i\alpha}^{(n_0)} p_{\alpha j}^{(n)} = \sum_\alpha \left[p_{i\alpha}^{(n_0)} - \varepsilon p_{j\alpha}^{(n)} \right] p_{\alpha j}^{(n)} + \varepsilon \sum_\alpha p_{j\alpha}^{(n)} p_{\alpha j}^{(n)} \\ &= \sum_\alpha \left[p_{i\alpha}^{(n_0)} - \varepsilon p_{j\alpha}^{(n)} \right] p_{\alpha j}^{(n)} + \varepsilon p_{jj}^{(2n)} \end{aligned}$$

而由于 $p_{i\alpha}^{(n_0)} - \varepsilon p_{j\alpha}^{(n)} \geq p_{i\alpha}^{(n_0)} - \varepsilon \geq 0$，可见

$$p_{ij}^{(n_0+n)} \geq m_j^{(n)} \sum_\alpha \left[p_{i\alpha}^{(n_0)} - \varepsilon p_{j\alpha}^{(n)} \right] + \varepsilon p_{jj}^{(2n)} = m_j^{(n)}(1-\varepsilon) + \varepsilon p_{jj}^{(2n)},$$

最后一个等式是因为概率求和为 1。由 i 的任意性，左边的不等式对所有 i 都成立，所以对最小的也成立：

$$m_j^{(n_0+n)} \geq m_j^{(n)}(1-\varepsilon) + \varepsilon p_{jj}^{(2n)}.$$

同理，考虑 $M_j^{(n)}$，有

$$p_{ij}^{(n_0+n)} \leq M_j^{(n)} \sum_\alpha \left[p_{i\alpha}^{(n_0)} - \varepsilon p_{j\alpha}^{(n)} \right] + \varepsilon p_{jj}^{(2n)} = M_j^{(n)} (1-\varepsilon) + \varepsilon p_{jj}^{(2n)},$$

类似可得

$$M_j^{(n_0+n)} \leq M_j^{(n)} (1-\varepsilon) + \varepsilon p_{jj}^{(2n)}.$$

从而

$$M_j^{(n_0+n)} - m_j^{(n_0+n)} \leq \left(M_j^{(n)} - m_j^{(n)} \right) (1-\varepsilon),$$

说明当 $n \to \infty$，$M_j^{(n)} - m_j^{(n)} \to 0$，$M^{(n)}$ 和 $m^{(n)}$ 趋于同一个极限。

若记 $\pi_j = \lim_n m_j^{(n)}$，则

$$\left| p_{ij}^{(n)} - \pi_j \right| \leq M_j^{(n)} - m_j^{(n)} \leq (1-\varepsilon)^{[n/n_0]-1},$$

即 $p_{ij}^{(n)}$ 以几何速度收敛于极限值 π_j。

因为 $m_j^{(n)} \geqslant m_j^{(n_0)} \geqslant \varepsilon > 0, n \geqslant n_0$，所以 $\pi_j > 0$。这就推出了 (2.2) 和 (2.3)。

接下来，我们说明 (2.2) 和 (2.3) 可以推出 (2.1)。因为状态数有限，所以对任意充分小的 $\varepsilon > 0$，存在 n_0 使得对任意 i, j，

$$\left| p_{ij}^{(n)} - \pi_j \right| \leq \varepsilon, n \geq n_0.$$

因此

$$p_{ij}^{(n)} \geq \pi_j - \varepsilon > 0, n \geq n_0.$$

最后我们说明 (2.3) 可以推出 (2.4)。注意到

$$\lim_{n\to\infty} \lambda^{\mathsf{T}} \mathcal{P}^n = \left(\sum_i \lambda_i \pi_1, \sum_i \lambda_i \pi_2, \ldots, \sum_i \lambda_i \pi_N \right) = \lambda^{\mathsf{T}}.$$

等式两边同时右乘 $\mathcal{P}$，左边的极限不变，右边变成 $\lambda^{\mathsf{T}}\mathcal{P}$，所以 $\lambda^{\mathsf{T}}\mathcal{P} = \lambda^{\mathsf{T}}$. □

满足条件 (2.4) 的分布被称为平稳分布. 用性质 $\lambda^{\mathsf{T}}\mathcal{P} = \lambda^{\mathsf{T}}$ 很容易说明，平稳分布为初始状态时，Markov 链的演化与时间无关：

命题 2.3 *设 $\{X_n\}$ 是 Markov 链，如果 X_0 是平稳分布，那么 $(X_k, \ldots, X_{k+l})$ 的联合分布不依赖于 k.*

如果 Markov 链是遍历的，那么平稳分布是唯一的：

命题 2.4 *设 $\{X_n\}$ 是遍历的 Markov 链，那么它有唯一平稳分布 μ.*

证明. 假设 μ 是另外一个平稳分布，那么 $\mu_j = \sum_\alpha \mu_\alpha p_{\alpha j} = \cdots = \sum_\alpha \mu_\alpha p_{\alpha j}^{(n)}$. 因为 $p_{\alpha j}^{(n)} \to \lambda_j$，所以 $\mu_j = \sum_\alpha (\mu_\alpha \lambda_j) = \lambda_j$. □

非遍历 Markov 链也可能存在（唯一）平稳分布，考虑如下转移矩阵：

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

它有唯一平稳分布 $\lambda = (1/2, 1/2)^\mathsf{T}$.

§2.2 Markov 奖励过程（MRP）

我们接下来的目标就是在 Markov 链上建立决策理论. 很多认知科学的研究证明，人和动物在做决策的时候，脑中会有一个*价值系统*，用来评估每一个行动的可能产生的价值/奖励。俗话说，最美味的食物是饿了一整天之后的白米饭；然而，如果我们每一顿饭都是山珍海味，就算是龙虾也会变得索然无味. 这说明，我们的价值系统会随着时间和自身的状态而发生改变。另一方面，本章开篇所讲的故事表明，我们的价值系统会对不同时期的奖励产生不同的反应，一般来说，我们会对即时奖励更加敏感.

总结上面的观察，我们可以在 Markov 链上引入类似的价值系统，这就是 Markov 奖励过程（MRP）. 在进入正式定义之前，我们先来看一个例子.

例 2.3 (李二的 MRP) 在一个学期中，学生李二可能处于几种状态：在教室 1 中、刷手机、在教室 2 中、约会、睡觉、考试通过、考试挂科。

学生在不同的状态下会有不同的奖励，例如，李二总是进入教室 1 逼迫自己学习，因为不情愿，所以奖励是 -2；但如果他被某个姑娘邀请去约会，他会很激动，所以奖励是 $+5$。

当处于某个状态时，李二会有一定的概率转移到另一个状态. 例如，在教室 1 中，因为李二并不情愿学习，所以他会有 0.5 的概率开始刷手机，还有另外 0.5 的概率，他发现差不多该去上课了，于是进入了教室 2. 简化起见，在状态转移中，我们考虑抽象的时间单位，对于李二来说，时刻只会有 $t = 0, 1, 2, \ldots$

李二的人生就在这些状态之间循环往复，当他进入某个状态之后，他就会获得相应的奖励。这个过程可以被图 2.5 描述. [lhy: 重画]

李二除了会获得即时奖励，他还会对未来有预期。例如，尽管李二不愿意学习，但是考试通过的奖励是 $+10$，为了这么大的奖励，现在遭罪一些是值得的，所以他会愿意坐在教室 1 里自习。假如下一刻李二就要考试，这一刻他开始在教室 1 中自习，他对于

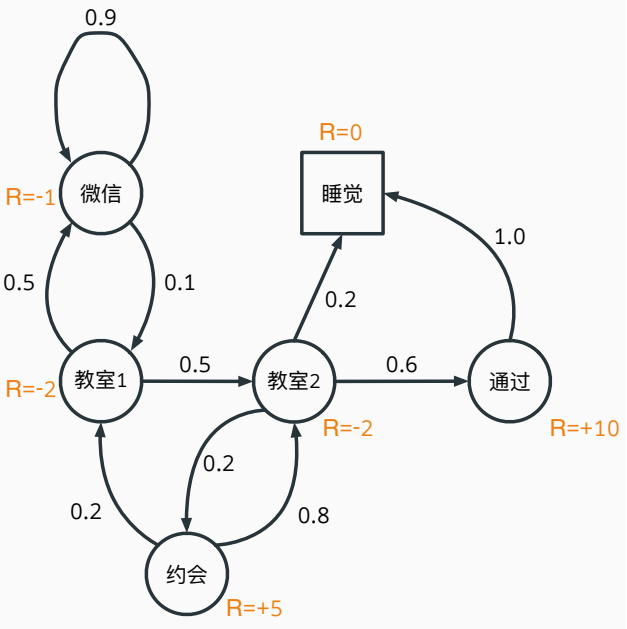


图 2.5: 学生 MRP

下一刻考试通过的奖励预期是 +9。也就是说，李二对未来的奖励会有一个折扣，这个折扣系数就是 $\gamma = 9/10 = 0.9$.

更一般地，我们可以形式上定义 MRP.

定义 2.2 (Markov 奖励过程，MRP) 一个 **Markov 奖励过程**（**Markov 奖励模型**，**MRP**）由四元组 $\langle \mathcal{S}, \mathcal{P}, \mathcal{R}, \gamma \rangle$ 构成：

- $\mathcal{S}$ 是一个有穷的状态集合.
- $\mathcal{P}$ 是一个状态转移矩阵，从 i 转移到 j 的概率记为 $\mathcal{P}_{i,j}$. 根据这一转移矩阵可以产生一个状态转移的 Markov 链 $\{S_t\}_{t \geq 0}$.
- $\mathcal{R}$ 是（单步期望）奖励函数，定义为 $\mathcal{R}_s = \mathbb{E}[R_{t+1} | S_t = s]$，其中，随机变量 R_{t+1} 表示下一阶段所处状态的奖励. 也就是说，当 t 时刻位于状态 s 时，$\mathcal{R}_s$ 是下一时刻获得的奖励的期望.
- γ 是一个折扣系数，$\gamma \in [0, 1]$.

在 MRP 中，我们最关心的并不是实时奖励，而是综合来看整个过程的奖励. 为了描述这一点，我们引入回报的概念.

定义 2.3 (回报) MRP 中，t 时刻以后的总**回报**G_t 定义为

$$G_t = R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R_{t+k+1}.$$

从定义中可以看到，$\gamma \in [0,1]$ 衡量了未来下一时段单位奖励在当前时刻的价值，γ 越小，我们更偏好即时奖励，因而更“短视”；γ 越大，我们更偏好未来奖励，因而更有“远见”.

我们这里对折扣做了极大的简化。折扣系数和时间、状态都有可能有依赖关系。

- 在李二的例子中，他可能更愿意十天后有一次约会，而不是通过考试，换言之，约会对他的折扣系数可能是 0.99，而考试通过的折扣系数可能是 0.9.
- 如果老师给李二布置的作业难度波动很大，那么李二做完作业之后对通过考试的折扣系数就会发生变化：作业简单，李二觉得自己已经掌握了知识，对通过考试的折扣系数就会降低；作业困难，李二觉得自己可能很难通过考试，对通过考试的折扣系数就会提高.

然而，在 MRP 的定义中，我们假设了一个固定的折扣系数，并且规定了一个简单的方法计算折扣：t 时刻后的奖励是即时奖励的 γ^t 倍. 这一定义体现了折衷的思想：如果折扣系数太符合实际，那么这个模型就不太实用。在我们的定义之下，随着时间改变，折扣系数会指数衰减，这不仅和实验结果比较符合，而且也使得 Markov 性能被很好利用.

除了回报之外，在 MRP 中，我们更关心的是*价值函数*，即处于某个状态时候预期的回报是多少：

定义 2.4 (价值函数) 在 MRP 中，**状态-价值函数**（或**价值函数**）定义为

$$v(s) = \mathbb{E}[G_t | S_t = s].$$

注意，等式右边有 t 但左边没有，所以我们需要说明这个定义对任意 t 都是成立的. 我们只需要说明对于任意的 t，$t+1$ 和 t 定义了同一个 $v(s)$. 注意，随机变量 R_{t+k} 只依赖于 S_{t+k}，即 $R_{t+k} = R(S_{t+k})$，所以

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[G_t | S_t = s] &= \mathbb{E}\left[\sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R_{t+k+1} \middle| S_t = s\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R(S_{t+k+1}) \middle| S_t = s\right] \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k \mathbb{E}[R(S_{t+k+1}) | S_t = s].
\end{aligned}$$

注意，项 $\mathbb{E}[R(S_{t+k+1})|S_t = s]$ 的定义满足 Markov 性，即

$$\mathbb{E}[R(S_{t+k+1})|S_t = s] = \mathbb{E}[R(S_{t+k+2})|S_{t+1} = s].$$

因而对于任意的 t，$t+1$ 和 t 定义了同一个 $v(s)$.

因此，这一定义蕴含了 Markov 性：只从当前起考虑未来收益，不考虑历史收益（沉没成本）的影响；也蕴含了时齐性：价值函数的定义不依赖于时刻 t（无穷阶段情形）. 我们在后面要各种相关概念的定义都需要用到这个性质，证明都是类似的，不再赘述.

接下来我们展示价值函数的计算方法. 直观上说，回报应该被被分解为两部分：即时回报 R_{t+1}以及未来的回报 $\gamma v(S_{t+1})$，也就是下一个状态期望回报再做折扣. 具体来说，我们有

$$\begin{aligned}
v(s) &= \mathbb{E}(G_t|S_t = s) \\
&= \mathbb{E}(R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} + \dots |S_t = s) \\
&= \mathbb{E}(R_{t+1} + \gamma(R_{t+2} + \gamma R_{t+3} + \dots)|S_t = s) \\
&= \mathbb{E}(R_{t+1} + \gamma G_{t+1}|S_t = s) \\
&= \mathbb{E}(R_{t+1}|S_t = s) + \gamma\mathbb{E}(G_{t+1}|S_t = s) \\
&= \mathbb{E}(R_{t+1}|S_t = s) + \mathbb{E}[\gamma v(S_{t+1})|S_t = s] \\
&= \mathcal{R}_s + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} \mathcal{P}_{s,s'} v(s').
\end{aligned}$$

其中倒数第二行是因为

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}(G_{t+1}|S_t = s) &= \sum_{s' \in \mathcal{S}} \mathbb{E}(G_{t+1}|S_{t+1} = s', S_t = s) \Pr(S_{t+1} = s'|S_t = s) \\
&= \sum_{s' \in \mathcal{S}} \mathbb{E}(G_{t+1}|S_{t+1} = s') \Pr(S_{t+1} = s'|S_t = s) \\
&= \sum_{s' \in \mathcal{S}} v(s') \Pr(S_{t+1} = s'|S_t = s) \\
&= \mathbb{E}[v(S_{t+1})|S_t = s].
\end{aligned}$$

我们因此得到了 **Bellman 方程**：

定理 2.3 (Bellman 方程) $v(s) = \mathcal{R}_s + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} \mathcal{P}_{s,s'} v(s')$.

在后面，我们将不断看到这样形式的方程，它将一个和 Markov 链有关的计算分解为当前的部分和未来的部分. 我们将这样形式的方程统称 Bellman 方程。

Bellman 方程可以用矩阵形式表达：

$$v = \mathcal{R} + \gamma \mathcal{P} v.$$

这里 v 是列向量 $v = (v(s))_{s \in \mathcal{S}}$.

写成矩阵形式之后，我们可以看到，Bellman 方程其实是一个线性方程，可以被直接解:

$$v = \mathcal{R} + \gamma \mathcal{P} v \implies (I - \gamma \mathcal{P}) v = \mathcal{R} \implies v = (I - \gamma \mathcal{P})^{-1} \mathcal{R}.$$

我们还可以有另一种观点，考虑一个映射 $f : \mathcal{S} \to \mathcal{S}$，$f(v) = \mathcal{R} + \gamma \mathcal{P} v$，那么 Bellman 方程可以被写作

$$v = f(v).$$

因此，v 是 f 的*不动点*. 在第八章，我们将系统地讨论不动点的性质以及它对于 Markov 链相关模型的重要性.

回到解 Bellman 方程，对于 n 个状态的 Markov 链，用线性方程组法的计算复杂度为 $\mathcal{O}(n^3)$. 对于较小的 MRP 可以直接解，太大的 MRP 开销太大. 对于大型 MRP，可以采用迭代算法，例如：

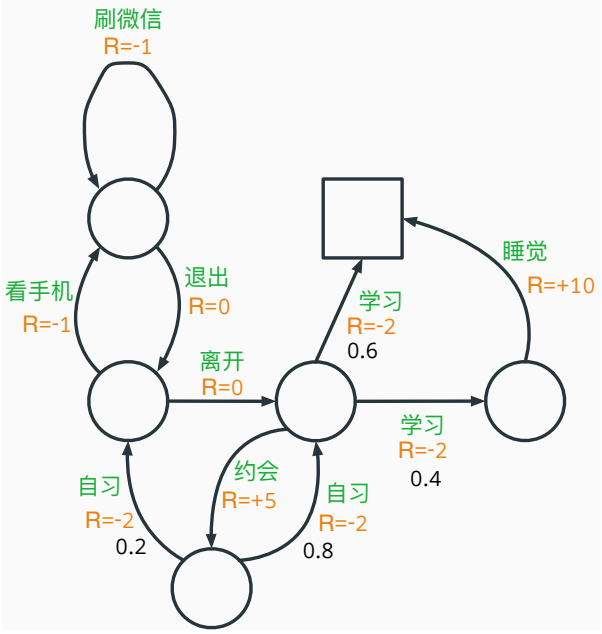
- 动态规划
- Monte-Carlo 评估
- 时序差分学习

动态规划法的思路我们将在第 2.4 节中介绍.

§2.3 Markov 决策过程（MDP）

上一节中我们建模了 Markov 链上的价值系统，即 MRP，接下来我们进入建模决策的环节。回顾李二的例子（例 2.3），我们在 MRP 中忽略了一个非常重要的考虑：当李二坐在教室 1 中的时候，李二不是随机地开始刷手机的，他需要*选择*开始刷手机。换言之，在 MRP 中，在当前状态可以做什么*行动*是缺失的。

此外，李二的奖励其实不是由状态决定的，而是由他做了什么行动决定的，这样，李二才能评估做什么行动可以最大化自己的奖励，然后选择奖励高的那个行动。实际上，认知神经科学的研究表明，人体的运动控制就是由类似的机制完成的：首先，大脑皮层会提出若干不同的运动计划，这些运动计划对应了不同的奖励（由多巴胺浓度来表征），人



[lhy: 重画]

图 2.6: 学生 MDP

脑中有一个被称作基底神经节的结构，它负责“放行”奖励高于某个阈值的运动计划，于是人就可以产生这个动作了。

综合以上这些思考，我们就可以给出 *Markov 决策过程*（MDP）的模型。我们还是先看李二的例子，然后再推广到一般的情况。

例 2.4 (李二 MDP) 李二的 MDP 见图 2.6. 在图中，状态依然是之前状态，但是状态的转移被给上了两个标签：(1) 这个转移是什么动作引起的（紫色），(2) 这个动作可以带来多少的奖励（蓝色）。例如，当李二在教室 1 的时候，她如果选择看手机，那么就会有 -1 的奖励，并且进入刷手机的状态。

接下来，我们给出一般的 MDP 的定义.

定义 2.5 (Markov 决策过程，MDP) **Markov 决策过程（MDP）**是一个 MDP 是五元组 $\langle \mathcal{S}, \mathcal{A}, \mathcal{P}, \mathcal{R}, \gamma \rangle$，其中

- $\mathcal{S}$ 是一个有限的状态集合.
- $\mathcal{A}$ 是一个有限的行动（action）集合.
- $\mathcal{P}$ 是状态转移概率矩阵，

$$\mathcal{P}^{a}_{ss'} = \Pr(S_{t+1} = s' | S_t = s, A_t = a).$$

- $\mathcal{R}$ 是一个奖励函数，$\mathcal{R}_s^a = \mathbb{E}(R_{t+1}|S_t = s, A_t = a)$，随机变量 R_{t+1} 是进行某一行动到达某一状态后的奖励.
- γ 是一个折扣系数 $\gamma \in [0,1]$.

现在我们对比 MDP 和 MRP。MDP 中，状态转移矩阵依赖动作，奖励函数也依赖动作. 在李二的例子中，在教室 2 如果选择学习，尽管都是在学习，但是学习并不一定会产生一个确定的结果：他会有 0.4 的概率睡着，0.6 的概率继续学习。自然，睡着的奖励和继续学习的奖励是不同的.

定义 2.6 (策略) 一个策略 π 是给定状态下行动的分布，即

$$\pi(a|s) = \Pr(A_t = a|S_t = s).$$

一个策略完全决定了一个智能体在 MDP 环境中的行为. 它的定义蕴含着 Markov 性：MDP 的策略取决于当前状态，而非历史状态；也蕴含着时齐性：MDP 的策略不依赖于时刻 t. 这样的定义会方便我们讨论价值函数以及决策的问题.

MDP 与 MDP 的关系由策略给出.

命题 2.5 *给定一个 MDP $\mathcal{M} = \langle \mathcal{S}, \mathcal{A}, \mathcal{P}, \mathcal{R}, \gamma \rangle$ 和一个策略 π，$\langle \mathcal{S}, \mathcal{P}^\pi \rangle$ 是一个 Markov 链，$\langle \mathcal{S}, \mathcal{P}^\pi, \mathcal{R}^\pi, \gamma \rangle$ 是一个 MRP，其中*

$$\mathcal{P}_{s,s'}^\pi = \mathbb{E}_{a\sim\pi(\cdot|s)}(\mathcal{P}_{s,s'}^a) = \sum_{a\in\mathcal{A}} \pi(a|s)\mathcal{P}_{s,s'}^a,$$

$$\mathcal{R}_s^\pi = \mathbb{E}_{a\sim\pi(\cdot|s)}(\mathcal{R}_s^a) = \sum_{a\in\mathcal{A}} \pi(a|s)\mathcal{R}_s^a.$$

证明. 对行动利用全概率公式. □

现在我们有三个概念，MDP，MRP，以及 Markov 链，命题 2.6 给了他们三者的关系，我们可以总结到图 2.7。

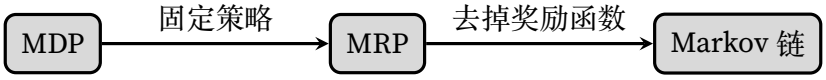


图 2.7: MDP，MRP 和 Markov 链的关系

对于李二来说，选择什么样的策略很大程度取决于他能从中获得多少奖励。同样，在 MDP 中，我们可以定义回报的概念。

定义 2.7 (回报) 在 MDP 中，t 时刻以后的总**回报**G_t 定义为

$$G_t = R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R_{t+k+1}.$$

类似 MRP，我们需要定义相应的*价值函数*. 在 MDP 中，*状态-价值函数*和*行动-价值函数*是两个重要的价值函数，它们分别描述了从某一状态出发，遵从某一策略的期望回报.

定义 2.8 (价值函数) **状态-价值函数** $v_\pi(s)$ 是从状态 s 出发，遵从策略 π 的期望回报

$$v_\pi(s) = \mathbb{E}_\pi(G_t | S_t = s).$$

行动-价值函数 $q_\pi(s,a)$ 是从状态 s 出发，采取行动 a，遵从策略 π 的期望回报

$$q_\pi(s,a) = \mathbb{E}_\pi(G_t | S_t = s, A_t = a).$$

注意，类似 MRP 中的价值函数，MDP 中的价值函数定义也不依赖 t 的选择，这是因为 MDP 的 Markov 性和时齐性。

行动-价值函数比起状态-价值函数更加具体，它可以帮助李二评判在当前选择每一个行动的回报，从而选择最优的行动. 而状态-价值函数则是对行动-价值函数的一个期望，因而是李二预期他从这个状态出发的回报. 具体来说，这两个价值函数有如下关系：

命题 2.6 *状态-价值函数 $v_\pi(s)$ 和行动-价值函数 $q_\pi(s,a)$ 之间有如下关系：*

$$v_\pi(s) = \mathbb{E}_{a\sim\pi(\cdot|s)}(q_\pi(s,a)) = \sum_{a\in\mathcal{A}} \pi(a|s) q_\pi(s,a),$$

$$q_\pi(s,a) = \mathcal{R}_s^a + \gamma \sum_{s'\in\mathcal{S}} P_{s,s'}^a v_\pi(s').$$

证明. 用 $q_\pi(s,a)$ 来表示 $v_\pi(s)$，对行动 a 用全概率公式即可得到。

另一方面，用 $v_\pi(s)$ 来表示 $q_\pi(s,a)$ 也是全概率公式。具体来说，在状态 s 采取行动 a 之后，期望上有 $\mathcal{R}_s^a$ 的即时奖励，然后以 $\mathcal{P}_{s,s'}^a$ 的概率转移到状态 s'，在状态 s' 的期望回报是 $\gamma v_\pi(s')$。按照 s' 用全概率公式即可得到 $q_\pi(s,a)$. □

下面我们给出状态-价值函数和行动-价值函数的 Bellman 方程. 首先，价值函数可以被分解为*即时回报*加*未来的折扣回报*，具体来说

- 状态-价值函数可以被分解为：

$$v_\pi(s) = \mathbb{E}_\pi[R_{t+1} + \gamma v_\pi(S_{t+1}) | S_t = s].$$

- 行动-价值函数可以被类似地分解，

$$q_\pi(s,a) = \mathbb{E}_\pi[R_{t+1} + \gamma q_\pi(S_{t+1}, A_{t+1}) | S_t = s, A_t = a].$$

他们的计算方法和定理 2.3 中的方法类似. 继续仿照定理 2.3 的证明，我们可以得到 MDP 的 Bellman 方程：

定理 2.4 (Bellman 方程)

$$v_\pi(s) = \sum_{a\in\mathcal{A}} \pi(a|s) \left(\mathcal{R}_s^a + \gamma \sum_{s'\in\mathcal{S}} \mathcal{P}_{s,s'}^a v_\pi(s') \right),$$

$$q_\pi(s,a) = \mathcal{R}_s^a + \gamma \sum_{s'\in\mathcal{S}} \mathcal{P}_{s,s'}^a \sum_{a'\in\mathcal{A}} \pi(a'|s') q_\pi(s',a').$$

状态-价值函数的 Bellman 方程可以被写成矩阵形式：

$$v_\pi = \mathcal{R}^\pi + \gamma \mathcal{P}^\pi v_\pi = (I - \gamma \mathcal{P}^\pi)^{-1} \mathcal{R}^\pi.$$

注意，MDP 的 Bellman 方程只能告诉我们给定策略 π 的价值函数，它并不能告诉智能体（也就是李二）要如何行动，所以，接下来我们要讨论最优策略和最优价值函数.

定义 2.9 (最优价值函数) **最优状态-价值函数** $v_\star(s)$ 是所有策略中最大的状态-价值函数

$$v_\star(s) = \max_\pi v_\pi(s).$$

最优行动-价值函数 $q_\star(s,a)$ 是所有策略中最大的行动-价值函数

$$q_\star(s,a) = \max_\pi q_\pi(s,a).$$

相应地，最优价值函数确定了智能体在 MDP 中的最佳收益，解 MDP 即确定达到最优价值函数的策略.

在以上定义中可能会遇到这样的问题：对两个状态 s_1 和 s_2，存在两个不同的策略 π_1 和 π_2，使得 $v_\star(s_1) = v_{\pi_1}(s_1)$，$v_\star(s_2) = v_{\pi_2}(s_2)$. 此时，每个状态取到最大价值的策略 π 可能并不是同一个，因此 $v_\star$ 并不是某个特定策略可以实现的值。所以，我们需要证明，存在一个策略 $\pi_\star$，使得对于任意的策略 π，$\pi_\star$ 都取得最大价值函数.

我们有如下定理，说明了这样策略的存在性，因而也证明了 MDP 解的存在性。

定理 2.5 (MDP 解的存在性) *对任意 MDP，存在一个策略 $\pi_\star$，*

- *对任意状态 s，$v_{\pi_\star}(s) = v_\star(s)$.*

- 对任意状态 s 和行动 a，$q_{\pi_\star}(s,a) = q_\star(s,a)$.

证明. 我们给出一个构造性证明，即找出最优策略. 我们先找到一个 $\pi_\star$ 最大化 q，然后说明这个 $\pi_\star$ 也可以最大化 v。

直观上说，我们只要对每个状态都选择最好的行动，这就是一个最优策略。具体来说，我们可以通过如下步骤找到 $\pi_\star$：

- 固定 s，
- 找到一个 $a_\star$ 最大化 $q_\star(s,\cdot)$，即 $q_\star(s,a_\star) = \max_a q_\star(s,a)$，令 $\pi_\star(a_\star|s) = 1$.
- 对其他 $a \neq a_\star$，令 $\pi_\star(a|s) = 0$. □

首先，根据选法，$\pi_\star$ 取得最优行动-价值函数. 接下来我们说明，它也取得了最优状态-价值函数. 任意策略 π，给定状态 s，我们有如下计算：

$$\begin{aligned} v_\pi(s) &= \mathbb{E}_{a\sim\pi(\cdot|s)}[q_\pi(s,a)] \\ &\leq \mathbb{E}_{a\sim\pi(\cdot|s)}[q_\star(s,a)] \\ &\leq q_\star(s,a_\star) \\ &= v_{\pi_\star}(s). \end{aligned}$$ □

这个证明还有一个推论：

推论 2.2 *对任意 MDP，总存在一个非随机的最优策略，即对任意状态 s，$\pi_\star(a|s) \in \{0,1\}$.*

两个最优价值函数之间有如下关系：

命题 2.7

$$v_\star(s) = \max_a q_\star(s,a),$$

$$q_\star(s,a) = \mathcal{R}_s^a + \gamma \sum_{s'\in\mathcal{S}} \mathcal{P}_{s,s'}^a v_\star(s').$$

证明. 在定理 2.5 的证明中，我们将 π 取为 $\pi_\star$，于是有

$$v_\star(s) = v_{\pi_\star}(s) = q_\star(s,a_\star) = \max_a q_\star(s,a).$$

对于第二个等式，根据定理 2.5，

$$v_\star(s) = v_{\pi_\star}(s), \quad q_\star(s,a) = q_{\pi_\star}(s,a),$$

在命题 2.6 取 $\pi = \pi_\star$ 即可得到. □

根据上面结论，如果我们知道 $q_\star(s,a)$ 或者 $v_\star(s)$，我们就能获得最优策略. 这一计算同样依赖 Bellman 方程[1]：

定理 2.6 (Bellman 方程)

$$v_\star(s) = \max_a \left\{ \mathcal{R}_s^a + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} \mathcal{P}_{s,s'}^a v_\star(s') \right\},$$

$$q_\star(s,a) = \mathcal{R}_s^a + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} \mathcal{P}_{s,s'}^a \max_{a'} q_\star(s',a').$$

证明. 对于第一个方程，将命题 2.7 中第二个等式代入第一个等式即可得到.

对于第二个方程，将命题 2.7 中第一个等式代入第二个等式即可得到. □

Bellman 不是线性的. 因此很难有解析形式的解. 但是 MDP 的数值解是可以多项式时间求出来的. 我们一般采用迭代算法求解：

- 价值迭代
- 策略迭代
- Q-learning
- Sarsa

求解 MDP 的过程实际上就是人工智能中强化学习的核心步骤。在本节的开头，我们说过人脑运动控制机制。实际上，绝大部分的哺乳动物都具备类似这样的学习机制：通过奖励的反馈，动物可以学会如何行动，从而获得最大的奖励。这样的学习机制被称为强化学习。强化学习在很多复杂交互的环境中都有广泛的应用，例如围棋的 AlphaGo、星际争霸的 AlphaStar 等.

> **注.** Bellman 方程是强化学习、经济学动态优化的核心. Bellman 方程的推导是 Markov 链中最为常用的技巧：考虑从当前状态转移到下一状态，利用全概率公式，一步转移会将两个状态之间的概率（期望）用递推公式联系起来. 在随机过程中，有大量这样的例子：前向方程、*Wald* 等式、调和函数. 后面的*HMM* 也是类似的例子.

最后，我们谈谈深度强化学习。在一些非常复杂的情况下（例如下围棋），使用经典的迭代算法并不容易求解 MDP. 深度强化学习是一种结合了深度学习和强化学习的方法. 在深度强化学习中，用神经网络来表示 π 和 v，之后，用某种学习算法训练神经网络.

[1]在文献中，这一 Bellman 方程被称为 Bellman 最优性方程，而之前推导的 Bellman 方程被称为 Bellman 期望方程。为了不过度引入术语，我们这里不做这种区分。

在一些深度强化学习模型中（例如 AlphaZero），状态空间 $\mathcal{S}$ 也用一个神经网络表示. 用神经网络来表示状态空间的好处是可以减少人类的特征工程，让神经网络充分发掘状态空间好的表示方法.

在很多深度强化学习模型中（例如 AlphaGo），MDP 的策略是基于过去 k 期的状态做当前的决策，这样可以更好地利用状态的历史信息. 这样的决策模型等价于一个利用一期信息决策的 MDP（见习题[lhy: 出一下]），因此依然可以用同样的深度学习算法来求解。

§2.4 隐 Markov 模型（HMM）

在本节，我们考虑 Markov 链上的另一种应用. 在统计学和机器学习中，我们有时候要处理一类含时间的数据. 例如，如果我们希望利用机器的力量帮助我们炒股赚钱，就要考虑如何预测股价然后做出相应的决策，这样的投资模式被称为量化投资。在 1989 年到 2009 年间，量化界的传奇人物 James Simons 操盘大奖章基金，平均年回报率高达 35%，即便是在次贷危机爆发的 2007 年，该基金的回报率仍高达 85%。据说，让 Simons 成功的秘诀是隐 *Markov* 模型，这正是本节的主题.

我们先给出隐 Markov 模型的定义。

定义 2.10 (隐 Markov 模型，HMM) 一个**隐 Markov 模型**（**HMM**）是两列随机变量（被称为观测序列）$X_1, X_2, \ldots,$ 和 $z_1, z_2, \ldots,$（被称为隐状态序列）的序列，满足：

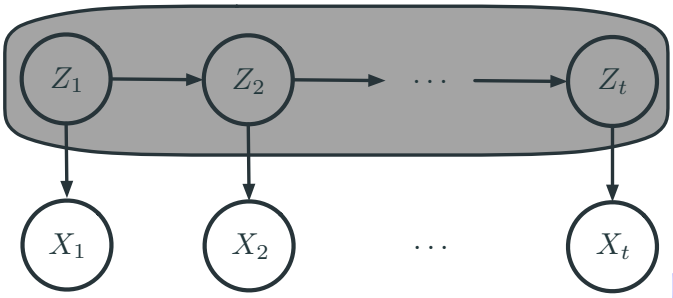
- $\{Z_t\}$ 构成一条 Markov 链.
- 对任意 t，X_t 的分布仅依赖于 Z_t.
- 对于任意 t，$\Pr(X_t|Z_t)$ 服从分布 $F(Z_t)$.

示意见图 2.8.

为了理解这一概念，我们可以考虑炒股的例子。

例 2.5 (美为 HMM) 假设我们要投资美为的股票，第 t 天的股票价格是 X_t。我们很希望理解整个 X_t 的变化趋势。然而，美为股价的背后有一个神秘势力操控。我们并不清楚这个神秘势力每天决策的具体细节，只知道他们的决策非常健忘，即他们的决策只依赖于前一天的决策. 他们会决定一个明天的预计股价 Z_t，这构成了一个 Markov 链 $\{Z_t\}$.

因为市场和汇率的波动，这个神秘势力无法完全决定股票的价格 X_t，然而，他们每一天所决定的预期价格 Z_t 会导致股票价格的变化，我们可以认为 X_t 仅依赖于 Z_t，但依



[lhy: 重画]

图 2.8: 隐 Markov 模型

然受到一些随机因素的影响. 作为简化，我们假设每天的随机影响是独立且一致的，服从分布 $F(Z_t)$。这样的得到的模型就是一个 HMM.

接下来，我们给 HMM 引入一些记号. 为简便起见，我们只研究有限离散的 HMM. 设 HMM $\mathcal{M}$ 所形成的概率测度是 $\Pr_{\mathcal{M}}$。我们假设模型中以下的量都是已知的：

- $\mathcal{Z}$: 有限的状态集合，即 Z_t 的取值集合.
- $\mathcal{X}$: 有限的观测集合，即 X_t 的取值集合.
- T：Markov 链 $\{Z_t\}$ 的转移矩阵，$T_{i,j} = \Pr_{\mathcal{M}}(Z_{t+1} = j | Z_t = i)$.
- M：给定隐状态时的观测概率，$M_{i,k} = \Pr(X_t = k | Z_t = i)$.
- λ：隐状态的初始分布.

我们会把序列 $A_i, \ldots, A_j$ 记作 $A_{i:j}$，然后将它看作一个向量。例如 $X = X_{1:t}$ 就是描述从时刻 1 到 t 的观测序列的随机向量，而 $Z = Z_{1:t}$ 就是描述从时刻 1 到 t 的隐状态序列的随机向量.

为了理解 HMM 的任务，我们接着看美为的例子。假设我们已经知道一个 HMM $\mathcal{M}$ 可以预测美为的股价 X_t，作为一个使用者，我们希望 $\mathcal{M}$ 确实有用。因此，我们要评估这个模型的表现。具体来说，我们希望知道，给定观测历史 $x = (x_1, x_2, \ldots, x_t)$，如何计算 $\Pr_{\mathcal{M}}(X = x)$. 这一方法也可以用来做预测：利用全概率公式，我们可以计算 $\Pr_{\mathcal{M}}(X_{t+1} = x_{t+1} | X = x)$，从而预测未来的股价.

评估一个 HMM 固然重要，但是评估依然是把 HMM 当成一个黑盒来使用。我们还希望知道这个模型背后到底发生了什么，这就是解释问题。具体来说，我们希望知道，给定观测历史 $x = (x_1, x_2, \ldots, x_t)$ 以及一个时刻 k，如何计算 $\Pr_{\mathcal{M}}(Z_k | X = x)$. 这一分布表明了在 k 时刻神秘势力更有可能做了什么样的决策，从而帮助我们更好理解股价的波动.

接下来我们将分别阐述如何解决评估问题和解释问题. 因为我们只讨论某一个具体的 HMM，为简便起见，我们此后都将概率测度 $\Pr_{\mathcal{M}}$ 简记为 $\Pr$.

2.4.1 评估问题

我们引入记号随机向量 $X = (X_1, \ldots, X_t)$，$Z = (Z_1, \ldots, Z_t)$. 我们考虑 HMM 的评估问题：给定一个 HMM $\mathcal{M}$，以及它的观测历史 $x = (x_1, x_2, \ldots, x_t)$，计算 $\Pr(X = x)$.

关键困难是我们不知道隐状态历史 $Z = (z_1, z_2, \ldots, z_t)$，因此我们需要利用全概率公式将隐状态消除掉，即：

$$\Pr(X = x) = \sum_{Z=(z_1,\ldots,z_t)\in\mathcal{Z}^t} \Pr(X = x|Z = z)\Pr(Z = z).$$

接下来我们分别计算 $\Pr(X = x|Z = z)$ 和 $\Pr(Z = z)$. 对于前者，因为每一个观测值 X_i 仅依赖于 Z_i，我们有

$$\Pr(X = x|Z = z) = \prod_{i=1}^{t} \Pr(X_i = x_i|Z_i = z_i) = M_{z_1,x_1} \cdot M_{z_2,x_2} \ldots M_{z_t,x_t},$$

对于后者，因为 Z 是一个 Markov 链，我们有

$$\begin{aligned}\Pr(Z = z) &= \Pr(Z_1 = z_1) \prod_{i=2}^{t} \Pr(Z_i = z_i|Z_{i-1} = z_{i-1}) \\ &= \lambda_{z_1} \cdot T_{z_1,z_2} \cdot T_{z_2,z_3} \ldots T_{z_{t-1},z_t}.\end{aligned}$$

以上的量都是已知的，所以我们已经可以计算评估问题了。然而，这一方法的需要计算的乘法次数是 $\mathcal{O}(t|\mathcal{Z}|^t)$，对于很大的 t 和 $\mathcal{Z}$，这是不可接受的计算量. 我们需要更好的计算方法.

接下来，我们采用前向方程（见定理 2.1）的思路，从前 k 步的结果推出前 $k+1$ 步的结果，然后据此列出递推方程. 在第 $k+1$ 步，Markov 链的状态发生了转移，按照从哪个状态转移到了哪个状态，我们可以拆分概率：

$$\begin{aligned}&\Pr(X_{1:k+1} = x_{1:k+1}) \\ =& \sum_{z\in\mathcal{Z}} \Pr(X_{1:k} = x_{1:k}, Z_k = z) \Pr(X_{k+1} = x_{k+1}|Z_k = z) \\ =& \sum_{z\in\mathcal{Z}} \Pr(X_{1:k} = x_{1:k}, Z_k = z) \sum_{z'\in\mathcal{Z}} \Pr(Z_{k+1} = z'|Z_k = z) \Pr(X_{k+1} = x_{k+1}|Z_{k+1} = z') \\ =& \sum_{z\in\mathcal{Z}} \Pr(X_{1:k} = x_{1:k}, Z_k = z) \sum_{z'\in\mathcal{Z}} T_{z,z'} M_{z',x_{k+1}}.\end{aligned}$$

如果把左边按照 Z_{k+1} 拆分，我们有

$$\sum_{z\in\mathcal{Z}} \Pr(X_{1:k+1}=x_{1:k+1}, Z_{k+1}=z) = \sum_{z\in\mathcal{Z}} \Pr(X_{1:k}=x_{1:k}, Z_k=z) \sum_{z'\in\mathcal{Z}} T_{z,z'} M_{z',x_{k+1}}.$$

如果令 $\alpha_k(z) := \Pr(X_{1:k}=x_{1:k}, Z_k=z)$，用类似的计算，我们有递推：

- 当 $k=1$，$\alpha_k(z) = \lambda(z) M_{z,x_k}$.
- 当 $k>1$，$\alpha_{k+1}(z) = \sum_{z'\in\mathcal{Z}} \alpha_k(z') T_{z',z} M_{z,x_{k+1}}$.

最后，$\Pr(X=x) = \sum_{z\in\mathcal{Z}} \alpha_t(z)$. 这一方法需要算的乘法次数是 $\mathcal{O}(t|\mathcal{Z}|^2)$，比前一种计算方法要快很多.

镜像地，我们可以使用后向方程的思路，从前 $k+1$ 步的结果推出前 k 步的结果. 同样可以列出递推方程. 定义 $\beta_k(z) := \Pr(X_{k+1:t}=x_{k+1:t}|Z_k=z)$，我们有递推：

- 当 $k=t$，$\beta_k(z)=1$.
- 当 $1\le k<t$，$\beta_k(z) = \sum_{z'\in\mathcal{Z}} T_{z,z'} M_{z',x_{k+1}} \beta_{k+1}(z')$.

于是，$\Pr(X=x) = \sum_{z\in\mathcal{Z}} \lambda(z) M_{z,x_1} \beta_1(z)$. 这一方法需要算的乘法次数是 $\mathcal{O}(t|\mathcal{Z}|^2)$.

2.4.2 解释问题

接下来我们讨论 HMM 的*解释问题*. 给定一个 HMM $\mathcal{M}=(\mathcal{Z},\mathcal{X},T,M,\lambda)$, 一列观测历史 $x=(x_1,x_2,\dots,x_t)$, 解释问题旨在寻找一个状态序列，能最好地解释这些历史观察. 具体来说我们考虑如下四个问题：

1. *过滤*：计算 $\Pr(Z_k=s|X_{1:k}=x_{1:k})$.
2. *平滑*：计算 $\Pr(Z_k=s|X=x)$，$k<t$.
3. *预测*：计算 $\Pr(Z_k=s|X=x)$，$k>t$.
4. *解码*：找到最有可能的状态序列 $z=(z_1,z_2,\dots,z_t)$.

首先考虑过滤：$\Pr(Z_k=s|X_{1:k}=x_{1:k})$. 回顾记号 $\alpha_k(s)=\Pr(X_{1:k}=x_{1:k},Z_k=s)$, 这其实已经足够我们计算过滤了. 根据条件概率的定义，我们有

$$\begin{aligned}\Pr(Z_k=s|X_{1:k}=x_{1:k}) &= \frac{\Pr(X_{1:k}=x_{1:k},Z_k=s)}{\Pr(X_{1:k}=x_{1:k})}\\ &= \frac{\alpha_k(s)}{\sum_{z\in\mathcal{Z}}\alpha_k(z)}.\end{aligned}$$

我们已经知道如何计算 $\alpha_k(s)$，所以这就可以用来计算过滤了.

然后是平滑：$\Pr(Z_k = s|X = x)$，$k < t$. 回顾记号 $\alpha_k(s) = \Pr(X_{1:k} = x_{1:k}, Z_k = s)$，以及 $\beta_k(s) = \Pr(X_{k+1:t} = x_{k+1:t}|Z_k = s)$. 可以证明（见习题[lhy: 出一下]）：

$$\Pr(z_k = s|X = x) = \frac{\beta_k(s)\alpha_k(s)}{\sum_{z\in\mathcal{Z}} \alpha_t(z)}. \tag{2.5}$$

同样，我们已经知道如何计算 $\alpha_k(s)$ 和 $\beta_k(s)$，所以这就可以用来计算平滑了.

之后是预测：$\Pr(Z_k = s|X = x)$，$k > t$. 首先用过滤计算 $\lambda = \Pr(Z_t = s|X = x)$. 从 t 之后的隐状态都只依赖于 t 时刻的隐状态 Z_t，因此，条件在 $X = x$ 下，$Z_t, Z_{t+1}, \ldots, Z_k$ 构成了一个 Markov 链，它的初始分布为 λ，转移矩阵为 T. 于是我们利用定理 2.1 来计算该 Markov 链第 $k - t$ 步的分布.

最后是解码：求 $z = (z_1, z_2, \ldots, z_t)$，使得 $\Pr(Z = z|X = x)$ 最大. 注意，这一概率最大等价于 $\Pr(Z = z, X = x)$ 最大. 我们也使用递归的想法来解决这个问题. 同样，在前 $k - 1$ 个状态已经选好之后，考虑最后一个状态应该选哪个。具体来说，定义

$$\delta_k(s) = \max_{z_{1:k-1}} \Pr(Z_{1:k} = (z_{1:k-1}, s), X_{1:k} = x_{1:k}).$$

于是

$$\begin{aligned}
&\delta_{k+1}(s) \\
&= \max_{z_{1:k}} \Pr(Z_{1:k+1} = (z_{1:k}, s), X_{1:k+1} = x_{1:k+1}) \\
&= \max_{z_{1:k}} \{\Pr(Z_{1:k} = z_{1:k}, X_{1:k} = x_{1:k}) \Pr(Z_{k+1} = s|Z_k = z_k) \Pr(X_{k+1} = x_{k+1}|Z_{k+1} = s)\} \\
&= \max_{q} \{\max_{z_{1:k-1}} \Pr(Z_{1:k} = (z_{1:k-1}, q), X_{1:k} = x_{1:k}) T_{q,s}\} M_{s,x_{k+1}} \\
&= \max_{q} \{\delta_k(q) T_{q,s}\} M_{s,x_{k+1}}.
\end{aligned}$$

这就给出了从 k 推导到 $k + 1$ 的递推方程。这一递推的初始状态是

$$\delta_1(s) = \Pr(Z_1 = s, X_1 = x_1) = \Pr(Z_1 = s) \Pr(X_1 = x_1|Z_1 = s) = \lambda(s) M_{s,x_1}.$$

利用这一递推，我们就可以解决解码问题了. 具体步骤如下：

- 利用递推公式，逐层用第 k 层的 δ_k 计算第 $k + 1$ 层的 δ_{k+1}，最后得到 δ_t。
- 求一个 z_t^* 使得 $\delta_t(z_t^*)$ 最大，根据定义，这个 z_t^* 也使得 $\Pr(Z = z, X = x)$ 最大，把这个最大值记为 δ_t^*.

- 接下来，逐层用第 $k+1$ 层的 δ^*_{k+1} 计算第 k 层的 δ^*_k 和 z^*_k。已知

$$\delta^*_{k+1} = \delta_{k+1}(z^*_{k+1}) = \max_q \{\delta_k(q) T_{q,z^*_{k+1}}\} M_{z^*_{k+1},x_{k+1}},$$

  从中找到一个 q 使得 $\delta_k(q)T_{q,z^*_{k+1}}$ 最大，记此时的 $\delta_k(q)$ 为 δ^*_k，$z^*_k = q$.

- 最后，我们就得到了最优的状态序列 $z = (z^*_1, z^*_2, \ldots, z^*_t)$，使得 $\Pr(Z = z, X = x)$ 最大.

以上算法被称为 *Viterbi 算法*，是解码问题的一个高效算法，它需要计算的乘法次数是 $\mathcal{O}(t|\mathcal{Z}|^2)$. 这一算法采用了*动态规划*的思想，实际上大部分和 Bellman 方程有关的问题（特别是最优化的问题）都可以用这一方法解决.

第二部分

信息与数据

第三部分

决策与优化

第四部分

逻辑与博弈

第五部分

认知逻辑

第六部分

附录：预备知识

参考文献

[Bre57] Leo Breiman. The Individual Ergodic Theorem of Information Theory. *The Annals of Mathematical Statistics*, 28(3):809–811, 1957.

[CT12] Thomas M. Cover and Joy A. Thomas. *Elements of Information Theory*. John Wiley & Sons, 2012.

[Huf52] David A. Huffman. A Method for the Construction of Minimum-Redundancy Codes. *Proceedings of the IRE*, 40(9):1098–1101, September 1952.

[Inf] Information | Etymology, origin and meaning of information by etymonline. https://www.etymonline.com/word/information.

[Jay02] Edwin T. Jaynes. *Probability Theory: The Logic of Science*. Cambridge University Press, 2002.

[KL51] S. Kullback and R. A. Leibler. On Information and Sufficiency. *The Annals of Mathematical Statistics*, 22(1):79–86, 1951.

[LLG+19] Mike Lewis, Yinhan Liu, Naman Goyal, Marjan Ghazvininejad, Abdelrahman Mohamed, Omer Levy, Ves Stoyanov, and Luke Zettlemoyer. BART: Denoising Sequence-to-Sequence Pre-training for Natural Language Generation, Translation, and Comprehension, October 2019.

[McM53] Brockway McMillan. The Basic Theorems of Information Theory. *The Annals of Mathematical Statistics*, 24(2):196–219, June 1953.

[RHW86] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams. Learning internal representations by error propagation. In *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition, Vol. 1: Foundations*, pages 318–362. MIT Press, Cambridge, MA, USA, January 1986.

[Rob49] Robert M. Fano. *The Transmission of Information*. March 1949.

[Sha48] C. E. Shannon. A mathematical theory of communication. *The Bell System Technical Journal*, 27(3):379–423, July 1948.

[Shi96] A. N. Shiryaev. *Probability*, volume 95 of *Graduate Texts in Mathematics*. Springer, New York, NY, 1996.

[Tin62] Hu Kuo Ting. On the Amount of Information. *Theory of Probability & Its Applications*, 7(4):439–447, January 1962.

[Uff22] Jos Uffink. Boltzmann's Work in Statistical Physics. In Edward N. Zalta, editor, *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*. Metaphysics Research Lab, Stanford University, summer 2022 edition, 2022.

[李 10] 李贤平. 概率论基础. 高等教育出版社, 2010.

索引