[AI2613 随机过程][第五讲] 马尔可夫链基本定理（一般版本）及一些应用

张驰豪

最后更新：*2025 年 4 月 21 日*

目录

1 马尔可夫链基本定理（一般版本）

在本节中，我们将证明具有无限状态的马尔可夫链的基本定理。右边我们给出了马尔可夫链一些性质的缩写，我们接下来使用这些缩写来描述要证明的结果。使用这些缩写，我们之前学习过的有限状态的马尔可夫链定理可以表述为：**[F]**+**[A]**+**[I]** $\implies$ **[S]**+**[U]**+**[C]**。我们上节课的讨论表明，如果没有 **[F]**，那么 **[S]** 不一定成立。我们现在说明，只需要把 **[F]** 换成 **[PR]** 就行。

- 非周期性：[**A**]periodicity,
- 不可约性：[**I**]rreducibility,
- 常返性：[**R**]erruence,
- 正常返性：[**P**]ositive [**R**]ecurrence,
- 存在平稳分布：Existence of [**S**]ationary Distribution,
- 存在唯一的平稳分布：[**U**]niqueness of Stationary Distribution,
- 收敛性：[**C**]onvergence,
- 有限状态：[**F**]initeness.

定理 1 (马尔可夫链基本定理)**.**

$$[\mathrm{PR}] + [\mathrm{A}] + [\mathrm{I}] \implies [\mathrm{S}] + [\mathrm{U}] + [\mathrm{C}].$$

在证明定理之前，我们需要准备一些数学工具。

1.1 大数定律

设 $X_1, X_2, \ldots$ 是一列独立同分布的可积随机变量，设它们的期望 $\mathbf{E}[X_1] = \mathbf{E}[X_2] = \cdots = \mu < \infty$。令 $\bar{X}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i$ 为样本均值。我们在概率论课学过若干大数定律，其中最常见的是以下两个：

定理 2 (辛钦弱大数定律)**.** *样本平均值依概率收敛于期望值：*

$$\bar{X}_n \xrightarrow{p} \mu \quad n \to \infty.$$

依概率收敛的定义是对于任意 $\varepsilon > 0$，

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}\left[\left|\bar{X}_n - \mu\right| < \epsilon\right] = 1.$$

定理 3 (科尔莫格洛夫强大数定律)**.** *样本平均值几乎必然（或以概率 1）收敛于期望值：*

$$\bar{X}_n \xrightarrow{\text{a.s.}} \mu \quad n \to \infty.$$

$$\mathbb{P}\left[\lim_{n\to\infty} \bar{X}_n \to \mu\right] = 1.$$

设 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ 为概率空间。此处 $\bar{X}_n \to \mu$ 表示存在 $M \in \mathcal{F}$ 满足：

- $\mathbb{P}(M) = 1$;
- $\forall \omega \in M, \bar{X}_n(\omega) \overset{n\to\infty}{\longrightarrow} \mu$。

顾名思义，*以概率收敛弱于以概率 1 收敛*。我们接下来使用强大数定律的到下面这个关于马尔可夫链的大数定律。

对于各种收敛的关系，以及各种花式大数定律，可以参见我的讲义（这个、这个和这个）。

定理 4 (马尔可夫链的强大数定律)**.** *若从状态 i 到 j，从 j 到 i 均有有限路径，那么*

$$\mathbb{P}_i\left[\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n} \mathbb{1}\left[X_t = j\right] = \frac{1}{\mathbf{E}_j\left[T_j\right]}\right] = 1.$$

回忆我们之前定义过 $\mathbb{P}_i[\cdot] = \mathbb{P}[\cdot \mid X_0 = i]$。

在进行证明之前，我们先仔细阅读一下这个定理的结论。我们假设 $i = j$ 并且 j 是正常返的。那么，对于每一个 n，$\sum_{t=1}^{n} \mathbb{1}[X_t = j]$ 表示在前 n 步中访问 j 的次数。于是 n 除上这个次数就应该表示平均每一次从 j 出发返回到 j 的平均时间。这个定理便是说明，这件事情在 n 趋向于无穷大时是以概率 1 成立的。

证明. 若 j 是非常返的，则马尔可夫链以概率 1 仅有限次访问 j。因此，

$$\mathbb{P}_i\left[\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n} \mathbb{1}\left[X_t = j\right] = \frac{1}{\mathbf{E}_j\left[T_j\right]}\right] = \mathbb{P}_i\left[\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n} \mathbb{1}\left[X_t = j\right] = 0\right] = 1.$$

因此，我们假设 j 是常返的。我们首先对 $i = j$ 的情况进行证明。我们称从 j 出发再次访问 j 为一个循环。记 C_r 为第 r 次循环的长度，$S_k = \sum_{r=1}^{k} C_r$。我们用 k_n 表示第 $n+1$ 步前总共经历了多少个循环，即 $k_n = \max\{k \mid S_k \le n\}$。则有 $S_{k_n} \le n < S_{k_n+1}$，从而 $\frac{S_{k_n}}{k_n} \le \frac{n}{k_n} < \frac{S_{k_n+1}}{k_n}$。注意到以概率 1，当 $n \to \infty$ 时 $k_n \to \infty$。因此以概率 1，

$$\lim_{k\to\infty} \frac{S_k}{k} \le \lim_{n\to\infty} \frac{n}{k_n} < \lim_{k\to\infty} \frac{S_{k+1}}{k}.$$

注意 $S_k = \sum_{r=1}^{k} C_r$，其中每个 C_r 是期望为 $\mathbf{E}_j\left[T_j\right]$ 的 i.i.d. 随机变量。根据强大数定律 (定理 3)，有 $\lim_{k\to\infty} \frac{S_k}{k} = \mathbf{E}_j\left[T_j\right]$，且 $\lim_{k\to\infty} \frac{S_{k+1}}{k} = \mathbf{E}_j\left[T_j\right]$。因此以概率 1，

$$\mathbf{E}_j\left[T_j\right] = \lim_{n\to\infty} \frac{n}{k_n} = \lim_{n\to\infty} \frac{n}{\sum_{t=1}^{n} \mathbb{1}\left[X_t = j\right]}$$

若 j 是常返的且 $i \neq j$，令 $T_{i\to j}$ 为从 i 出发第一次访问 j 的时间。则有：

$$\frac{S_{k_n} + T_{i\to j}}{k_n} \leq \frac{n}{k_n} < \frac{S_{k_n+1} + T_{i\to j}}{k_n}$$

由于 $\mathbb{P}_i\left[T_{i\to j} < \infty\right] = 1$，因此 $\mathbb{P}_i\left[\lim_{k\to\infty} \frac{T_{i\to j}}{k} = 0\right] = 1$。其余证明与 $i = j$ 的情况相同。 □

这里 P 可以类比为一个无穷维的转移矩阵。

推论 5. 令 P 为一个不可约马尔可夫链的转移函数，其中 $P^t(i,j) = \mathbb{P}\left[X_t = j | X_0 = i\right]$。则对于任意状态 i, j，

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{t=1}^{n} P^t(i,j) = \frac{1}{\mathbf{E}_j[T_j]}$$

证明. 根据定义 $P^t(i,j)$ 的定义，我们有

关于控制收敛定理，可以查看我的讲义。

$$\begin{aligned}
\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{t=1}^{n} P^t(i,j) &= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{t=1}^{n} \mathbf{E}_i\left[\mathbb{1}\left[X_t = j\right]\right] \\
\text{(期望的线性性)} \qquad &= \lim_{n\to\infty} \mathbf{E}_i\left[\frac{1}{n} \sum_{t=1}^{n} \mathbb{1}\left[X_t = j\right]\right] \\
\text{(控制收敛定理)} \qquad &= \mathbf{E}_i\left[\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{t=1}^{n} \mathbb{1}\left[X_t = j\right]\right] \\
\text{(定理 4)} \qquad &= \frac{1}{\mathbf{E}_j\left[T_j\right]}.
\end{aligned}$$

□

1.2 基本定理的证明

我们将首先证明平稳分布的存在性和唯一性（即 **[S]** 和 **[U]**）。

定理 6. [I] + [PR] $\implies$ [S] + [U].

证明. 我们首先证明 [U]。设 $\mathcal{S}$ 为状态集合。假设 π 是马尔可夫链的一个平稳分布，即：

$$\forall j \in \mathcal{S},\ \forall t \geq 0,\ \sum_{i\in\mathcal{S}} \pi(i) P^t(i,j) = \pi(j)$$

这意味着对于 $n \geq 1$，

$$\frac{1}{n}\sum_{i\in\mathcal{S}}\pi(i)\sum_{t=1}^{n}P^t(i,j)=\pi(j)$$

取 $n\to\infty$，得：

$$\begin{aligned}
\pi(j) &= \lim_{n\to\infty}\sum_{i\in\mathcal{S}}\pi(i)\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}P^t(i,j)\\
\text{(控制收敛定理)}\quad &= \sum_{i\in\mathcal{S}}\pi(i)\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}P^t(i,j)\\
\text{(推论 5)}\quad &= \sum_{i\in\mathcal{S}}\pi(i)\cdot\frac{1}{\mathbf{E}_j\left[T_j\right]}\\
&= \frac{1}{\mathbf{E}_j\left[T_j\right]}.
\end{aligned}$$

这说明了，如果马尔可夫链有平稳分布，那它必须满足 $\pi(j)=\frac{1}{\mathbf{E}_j\left[T_j\right]}$。我们接下来证明 π 确实是一个平稳分布。这个证明有一点微妙，我们先从 $\mathcal{S}$ 是有限集开始。

$\mathcal{S}$ 是有限集 我们首先假设 $\mathcal{S}$ 是有限集，这样我们可以安心地在下面的计算中交换求极限和求和的顺序。我们先来验证 π 的每一项加起来是 1。我们有：

注意到，这里第三个等号交换求和和极限用到了 $\mathcal{S}$ 是一个有限集。

$$\sum_{j\in\mathcal{S}}\pi(j)=\sum_{j\in\mathcal{S}}\frac{1}{\mathbf{E}_j\left[T_j\right]}=\sum_{j\in\mathcal{S}}\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}P^t(i,j)=\lim_{n\to\infty}\sum_{j\in\mathcal{S}}\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}P^t(i,j)=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}\sum_{j\in\mathcal{S}}P^t(i,j)=1.$$

这表明 π 是一个合法的分布。接下来验证 π 确实是平稳分布。

根据推论 5，有

$$\frac{1}{\mathbf{E}_j\left[T_j\right]}=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}P^t(i,j)=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}P^{t+1}(i,j).$$

注意 $P^{t+1}(i,j)=\sum_{k\in\mathcal{S}}P^t(i,k)P(k,j)$，我们可以继续把上式写成

$$\lim_{n\to\infty}\sum_{k\in\mathcal{S}}P(k,j)\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}P^t(i,k)=\sum_{k\in\mathcal{S}}P(k,j)\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}P^t(i,k)=\sum_{k\in\mathcal{S}}P(k,j)\cdot\frac{1}{\mathbf{E}_k\left[T_k\right]}.$$

即，

事实上，当 $\mathcal{S}$ 为有限集时，**[PR]** 等价于 **[I]**。

$$\pi(j)=\sum_{k\in\mathcal{S}}P(k,j)\cdot\pi(k).$$

$\mathcal{S}$ 是无限集　当 $\mathcal{S}$ 是无限集时，不再能随便交换极限与求和（容易验证，控制收敛定理的条件在这里不成立）。我们考虑 $\mathcal{S}$ 的每个有限子集 A，并作类似计算，可以得到

$$\sum_{j\in A}\pi(j)=\sum_{j\in A}\frac{1}{\mathbf{E}_j[T_j]}=\sum_{j\in A}\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}P^t(i,j)=\lim_{n\to\infty}\sum_{j\in A}\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}P^t(i,j)=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}\sum_{j\in A}P^t(i,j)\le 1.$$

因此，

$$\sum_{j\in\mathcal{S}}\pi(j)=\sup_{\text{finite }A\subseteq\mathcal{S}}\sum_{j\in A}\pi(j)=:C\le 1.$$

由于 [**PR**]，我们知道 $C\neq 0$。接下来将证明 π/C 是一个平稳分布。由我们刚证明的平稳分布的唯一性可得 $C=1$。

类似的，对于任意有限集合 $A\subseteq\mathcal{S}$，重复上面的计算，我们可以得到

$$\sum_{k\in A}P(k,j)\cdot\frac{1}{\mathbf{E}_k[T_k]}\le\frac{1}{\mathbf{E}_j[T_j]}.$$

因此，

$$\sum_{k\in\mathcal{S}}P(k,j)\cdot\frac{1}{\mathbf{E}_k[T_k]}=\sup_{\text{finite }A\subseteq\mathcal{S}}\sum_{k\in A}P(k,j)\cdot\frac{1}{\mathbf{E}_k[T_k]}\le\frac{1}{\mathbf{E}_j[T_j]}.$$

我们将证明等号确实成立。假设反之不成立，即假设

$$\sum_{k\in\mathcal{S}}P(k,j)\cdot\frac{1}{\mathbf{E}_k[T_k]}<\frac{1}{\mathbf{E}_j[T_j]}.$$

将两边对所有 $j\in\mathcal{S}$ 求和，我们得到

$$\sum_{k\in\mathcal{S}}\frac{1}{\mathbf{E}_k[T_k]}<\sum_{j\in\mathcal{S}}\frac{1}{\mathbf{E}_j[T_j]},$$

这显然是矛盾的。由此我们得知

$$\sum_{k\in\mathcal{S}}P(k,j)\cdot\frac{1}{\mathbf{E}_k[T_k]}=\frac{1}{\mathbf{E}_j[T_j]},$$

并且 $\hat{\pi}(j)=\frac{1}{C\cdot\mathbf{E}_j[T_j]}$ 是一个平稳分布。由于分布的唯一性，我们可以得出 $C=1$。　□

当然，我们最后还要说明，加上条件 [**A**] 之后，便能得到 [**C**]。但这只需要重复我们在有限场合基于耦合的证明即可，请读者自己补足证明。

2　2-SAT 的随机游走算法

SAT 问题，即判断一个给定的 CNF （Conjunctive Normal Form, 合取范式）的公式是否可满足，是计算机科学中一个非常核心的问题。对于任何 $k\ge 2$，k-SAT 是 SAT 的特例，满

足其中 CNF 公式的子句恰好由 k 个变量组成。例如，

$$\phi = (x \vee y) \wedge (y \vee \bar{z}) \wedge (\bar{x} \vee z)$$

是一个 2-CNF 公式，而 $x = y = z = \text{true}$ 是使其满足的赋值之一。SAT 属于 **NP**-完全问题，并且当 $k \geq 3$ 时我们有 k-SAT 也是 **NP**-完全的。我们在算法课上学过，可以使用寻找强连通分量的算法在线性时间内解决 2-SAT 问题。今天，我们在此介绍一种简单的随机化算法，该算法也能以高概率在多项式时间内解决此问题。

设 ϕ 为一个 2-CNF 公式，$V = \{v_1, v_2, ..., v_n\}$ 为其变量集合。算法按照如下步骤运行：

- *随机选择一个赋值* $\sigma_0 : V \to \{\text{true}, \text{false}\}$。
- *对于* $t = 0, 1, 2, \ldots, 100n^2$*：*

  如果 σ_t *满足* ϕ*，输出* σ_t*；*

  否则，随机选取一个未满足的子句，例如 $c = x \vee y$。*从* $\{x, y\}$ *中均匀随机选择一个变量，并翻转其赋值。记翻转后的赋值为* σ_{t+1}。
- *输出 "ϕ is not satisfiable"*。

这个算法的运行时间显然是 $O(n^2 \cdot m)$，其中 m 是公式子句的个数。我们现在说明其正确性保证。

定理 7. *该算法以至少* $1 - \frac{1}{100}$ *的概率输出正确答案。*

证明. 显然，如果这个 2-SAT 的输入实例没有解，那么我们的算法始终会给出正确答案。因此我们只需考虑在实例确实有一个可行赋值的条件下，算法输出无解的概率。

我们的算法生成 $100n^2 + 1$ 个赋值 $\sigma_0, \sigma_1, \ldots, \sigma_{100n^2}$。我们现在将说明，以至少 $1 - \frac{1}{100}$ 的概率，某个 σ_k（其中 $k \in \{0, \ldots, 100n^2 + 1\}$）是一个满足赋值。我们固定一个*任意的* $\sigma : V \to \{\text{true}, \text{false}\}$ 的可满足赋值。实际上我们证明以下命题：对于足够大的 k，在事件 "$\sigma_0, \sigma_1, \ldots, \sigma_k$ 中没有一个是满足赋值" 发生的条件下，$\sigma_{k+1} = \sigma$ 的概率很高。

这个结论乍看起来有些奇怪，甚至有些反直觉：所有赋值的个数是 2^n 个，而有可能其中只有一个是可以满足远公式的赋值。我们为什么可以仅仅随机采样了 $O(n^2)$ 个赋值，就以高概率保证能找到那个可满足的赋值呢？

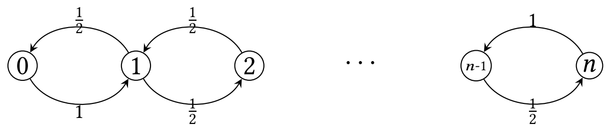
令 $\{X_t\}_{t=0}^{100n^2}$ 为随机变量序列，其中

$$X_t := |\{v \in V \mid \sigma_t(v) = \sigma(v)\}|.$$

注意，$\{X_t\}_{t=0}^{100n^2}$ 不是一个马尔科夫链，因为它只包含了 σ_t 的部分信息，因此我们无法通过 X_t 确定 X_{t+1} 的分布。

首先我们验证 $\mathbb{P}[X_{t+1} = X_t + 1 \mid \sigma_t] \geq \frac{1}{2}$ [1] 并且 $\mathbb{P}[X_{t+1} = X_t - 1 \mid \sigma_t] \leq \frac{1}{2}$。不失一般性地假设我们在第 t 轮选择了子句 $c = x \vee y$。由于 σ_t 不满足 c，我们有 $\sigma_t(x) = \sigma_t(y) = \text{false}$。类似地，$x \vee y$ 在 σ 下是满足的，因此 $\sigma(x)$ 和 $\sigma(y)$ 有三种可能的赋值：

[1] 令 Y 为随机变量，则 $\mathbb{P}[\cdot \mid Y] : \text{Ran}(Y) \to \mathbb{R}$ 定义为 $\mathbb{P}[\cdot \mid Y] = \mathbf{E}[\mathbb{1}[\cdot] \mid Y]$。注意 $\mathbb{P}[\cdot \mid Y]$ 是随机变量。此处我们稍微滥用符号记号，将事件 "$\forall a \in \text{Ran}(Y), \mathbb{P}[\cdot \mid Y = a] \geq \frac{1}{2}$" 写作 $\mathbb{P}[\cdot \mid Y] \geq \frac{1}{2}$。



- 若 $\sigma(x)=\text{true}$ 且 $\sigma(y)=\text{false}$，$\mathbb{P}\left[X_{t+1}=X_t+1 \mid \sigma_t\right]=\mathbb{P}[\text{flip } x]=\frac{1}{2}$，且 $\mathbb{P}\left[X_{t+1}=X_t-1 \mid \sigma_t\right]=\mathbb{P}[\text{flip } y]=\frac{1}{2}$。
- 若 $\sigma(x)=\text{false}$ 且 $\sigma(y)=\text{true}$，类似地我们有 $\mathbb{P}\left[X_{t+1}=X_t+1 \mid \sigma_t\right]=\mathbb{P}\left[X_{t+1}=X_t-1 \mid \sigma_t\right]=\frac{1}{2}$。
- 若 $\sigma(x)=\text{true}$ 且 $\sigma(y)=\text{true}$，$\mathbb{P}\left[X_{t+1}=X_t+1 \mid \sigma_t\right]=\mathbb{P}[\text{flip } x \text{ or } y]=1$。

因此，在 $\sigma_0,\sigma_1,\ldots,\sigma_t$ 中没有一个是可满足赋值的条件下，我们有 $\mathbb{P}\left[X_{t+1}=X_t+1 \mid \sigma_t\right]\geq\frac{1}{2}$。考虑定义在 $[n]\cup\{0\}$ 上的 1 维随机游走 $\{Y_t\}_{t\geq 0}$，其中 $Y_0=X_0$，并且对于 $Y_t\notin\{0,1\}$，有

$$Y_{t+1}=\begin{cases}Y_t+1, & \text{w.p. } \frac{1}{2}\\ Y_t-1, & \text{w.p. } \frac{1}{2}\end{cases}.$$

若 $Y_t=0$，则 $Y_{t+1}=Y_t+1$ 的概率为 1；若 $Y_t=n$，则 $Y_{t+1}=Y_t-1$ 的概率为 1。

于是我们有[2]

$$\mathbb{P}\left[\text{算法是正确的}\right]\geq\mathbb{P}\left[\exists t\in[0,100n^2] \text{ s.t. } X_t=n\right]\geq\mathbb{P}\left[\exists t\in[0,100n^2] \text{ s.t. } Y_t=n\right].$$

假设初始时 $Y_0=X_0=i$。令 $T_{i\to n}$ 表示从 i 到 n 的首次到达时间。则

$$\mathbf{E}\left[T_{i\to n}\right]=\sum_{k=i}^{n-1}\mathbf{E}\left[T_{k\to k+1}\right].$$

对于 $i>0$，我们有

$$\mathbf{E}\left[T_{i\to i+1}\right]=\mathbb{P}\left[\mathscr{A}\right]+\mathbb{P}\left[\bar{\mathscr{A}}\right]\left(1+\mathbf{E}\left[T_{i-1\to i+1}\right]\right),$$

我们上节课定义过事件 $\mathscr{A}=[\text{第一次向右移动}]$。

又由于 $\mathbf{E}\left[T_{i-1\to i+1}\right]=\mathbf{E}\left[T_{i-1\to i}\right]+\mathbf{E}\left[T_{i\to i+1}\right]$，我们有 $\mathbf{E}\left[T_{i\to i+1}\right]=2+\mathbf{E}\left[T_{i-1\to i}\right]$。注意到 $T_{0\to 1}=1$，则

$$\mathbf{E}\left[T_{i\to n}\right]=\sum_{k=i}^{n-1}\mathbf{E}\left[T_{k\to k+1}\right]=\sum_{k=i}^{n-1}2k+1=n^2-i^2\leq n^2.$$

[2]第二个不等式可通过构造满足对于所有 $t\geq 0$，均有 $Y_t\leq X_t$ 的耦合来验证。该耦合的存在性可由 $\mathbb{P}\left[X_{t+1}=X_t+1 \mid \sigma_t\right]\geq\mathbb{P}\left[Y_{t+1}=Y_t+1\right]$ 保证。具体来说，如果 $\{\sigma(x),\sigma(y)\}$ 中一个为 false，一个为 true，则 Y_{t+1} 与 X_{t+1} 的行为一致。如果 $\sigma(x)=\sigma(y)=$true，则 Y_{t+1} 以均匀随机方式向 +1 或 −1 移动。

我们然后使用马尔科夫不等式为 $\mathbb{P}\left[\exists t \in [0, 100n^2] \text{ s.t. } Y_t = n\right]$ 提供下界：

$$1 - \mathbb{P}\left[\exists t \in [0, 100n^2] \text{ s.t. } Y_t = n\right] = \mathbb{P}\left[T_{Y_0 \to n} > 100n^2\right] \leq \frac{\mathbf{E}\left[T_{Y_0 \to n}\right]}{100n^2} \leq \frac{1}{100}.$$

由式 (2)，我们可以得到 $\mathbb{P}\left[\text{算法输出正确解}\right]$ 总是不小于 $1 - \frac{1}{100}$。 □