[AI2613 随机过程][第二讲] 有限状态马尔可夫链

张驰豪

最后更新：2025 年 3 月 5 日

目录

我们今天开始来研究马尔可夫链，最基本也是最重要的的随机过程之一。我们将从离散的马尔可夫链开始，即随机变量的取值是有限或者至多可数的。

1 离散马尔可夫链的基本概念

1.1 定义

在我们这门课程中，我们总是假设这些随机变量生活在一个合适的概率空间 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ 中。事实上，这个概率空间的存在性并不平凡，比如，我们在第一次作业中已经看到如何构造投掷无限个独立硬币的概率空间。更一般的构造可以参见词条 Kolmogorov extension theorem 以及那儿的参考文献。

定义 1 (离散马尔可夫链)**.** *假设有一列随机变量*

$$X_0, X_1, \ldots, X_t, X_{t+1}, \ldots$$

其中 $X_t \in \Omega$，Ω 是一个可数集合。如果 $\forall t \geq 1$，随机变量 X_t 的分布只依赖于 X_{t-1}，即 $\forall a_0, a_1, \ldots, a_t \in \Omega$，

$$\mathbb{P}\left[X_t = a_t \mid X_{t-1} = a_{t-1}, \ldots, X_1 = a_1, X_0 = a_0\right] = \mathbb{P}\left[X_t = a_t \mid X_{t-1} = a_{t-1}\right].$$

那么，我们称 $\{X_t\}$ 为离散马尔可夫链。

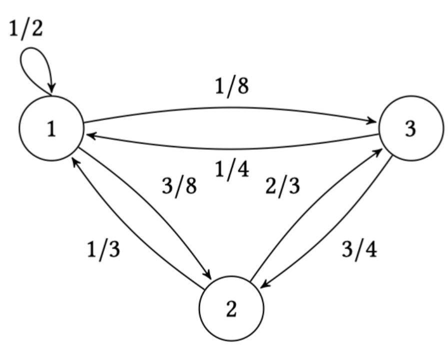
示例 2 (ℤ 上的随机游走)**.** 考虑 $\mathbb{Z}$ 上的随机游走。初始位置为 0，每轮抛掷一枚公平硬币决定移动方向：以 50% 的概率向左移动，以 50% 的概率向右移动。如果用 X_t 表示时间 t 时的位置，则 $X_0 = 0$，对于每个 $t > 0$，有 $X_t = X_{t-1} + 1$ 的概率为 50%，以及 $X_t = X_{t-1} - 1$ 的概率为 50%。这是一个马尔可夫链，因为时间 t 时的位置只依赖于时间 $t-1$ 时的位置。该链的状态空间是可数无限集 $\mathbb{Z}$。

示例 3 (洗牌问题)**.** 考虑一种简单的"顶牌随机插入（*Top-to-Random*）"洗牌方式：假设有 n 张牌，每次将顶牌取出并随机插入到 $n+1$ 个可能位置之一。重复执行洗牌操作的过程构成一个马尔可夫链，其状态空间为记为 S_n，即 n 张牌的排列的集合。

今天我们将仅讨论状态空间 $\Omega = [N]$ 为有限集的情况。在这种情况下，一个（时间齐次的）马尔可夫链可以用一个 $N \times N$ 的矩阵 $P = \left(p_{ij}\right)_{i,j\in[N]}$ 表示，称为马尔可夫链的**转移矩阵**，其中 $p_{ij} = \mathbb{P}\left[X_{t+1} = j \mid X_t = i\right]$，对 $\forall t \geq 0$ 成立。我们有时候会用 $P(i \to j)$ 来表示 p_{ij}。我们可以等价的用一个有 N 个顶点的加权有向图来表示，其中边 (i, j) 的权即为 p_{ij}。

在转移图里，当我们说存在一条有向边 (i, j) 时，一般默认了 $p_{ij} > 0$。

示例 4 (有限状态随机游走)**.** 以下的三顶点有向图对应于转移矩阵 $P = (p_{ij}) = \begin{bmatrix} 1/2 & 3/8 & 1/8 \\ 1/3 & 0 & 2/3 \\ 1/4 & 3/4 & 0 \end{bmatrix}$ 的马尔可夫链。我们有时称该图为 P 的 **转移图**。



我们通常会把有限图上的的随机游走，和（时间齐次的）有限状态的马尔可夫链看成同一件事情。

对于任意时间 $t \geq 0$，我们用 μ_t 表示 X_t 的分布，即

$$\forall i \in [N],\ \mu_t(i) = \mathbb{P}\left[X_t = i\right].$$

因此，和一般概率论里面的“分布函数”不一样，在离散状态的场合，为了方便起见，我们把 $\mu_t : [N] \to [0,1]$ 看作是一个定义在 $[N]$ 上的函数。它也可以等价的看成是 $[0,1]^{[N]}$ 里的一个（column）向量。

根据全概率公式，有 $\mu_{t+1}(j) = \sum_i \mu_t(i) \cdot p_{ij}$ 成立。把它写成矩阵的形式，便是

$$\mu_t^\top P = \mu_{t+1}^\top.$$

这便给了我们一个从 μ_0（或者任何 μ_s，其中 $s < t$）出发计算 μ_t 的公式

$$\mu_t^\top = \mu_0^\top P^t.$$

由此可见，每个时间点的分布完全由转移矩阵 P 和初始分布 μ_0 决定。因此，有时为了简便，我们可能直接用转移矩阵 P 来表示一个马尔可夫链，并说出类似于“马尔可夫链 P”的话。

1.2 平稳分布（Stationary Distribution）

对于马尔可夫链 P，一个特别重要的分布是应用 P 后保持不变的分布。

定义 5 (平稳分布). *如果一个分布 π 在马尔可夫链中随时间推移保持不变，即满足*

$$\pi^\top P = \pi^\top,$$

那么称 π 为 P 的 ***平稳分布***。

马尔可夫链的一个重要算法应用是 **马尔可夫链蒙特卡罗 (MCMC)** 方法。这是一种设计算法以从特定分布 π 中采样的通用方法。MCMC 的核心思想是：

- 首先设计一个马尔可夫链，使其平稳分布为目标分布 π；
- 从某个初始分布开始模拟该链，经过若干步后输出链的状态。

因此，我们希望当 t 足够大时，分布 μ_t 接近 π。

示例 6 (洗牌问题). *回忆我们之前定义的“顶牌随机插入”洗牌问题。不难验证，对于所有 $n!$ 种排列，均匀分布 $\left(\frac{1}{n!}, \frac{1}{n!}, \ldots, \frac{1}{n!}\right)^\top$ 是其一个平稳分布。*

我们平时的洗牌过程实际上就是一个执行 MCMC 算法的过程。我们期待在洗了若干次之后，得到的排列的分布接近均匀分布。为什么我们平时常用的那些洗牌手法是有效的？为什么洗了足够次之后我们相信牌的顺序就会足够随机？假设如果我们想出老千，希望洗完后牌的顺序接近我们想要的某种顺序，应该怎么办？这便引出了我们平稳分布的几个基本问题。

- 每个马尔可夫链是否都有平稳分布?
- 如果一个马尔可夫链有平稳分布，它是否唯一?
- 如果链有唯一的平稳分布，是否对于任意初始分布 μ_0，μ_t 总是收敛到它?
- 如果 μ_t 总是收敛到平稳分布，收敛的速率是多少?
- 如何设计一个马尔可夫链，使得它的平稳分布是某个指定的分布?

我们将在今天回答前三个问题和第五个问题。至于第四个问题，它是一个活跃的研究领域，我们将在本课程中学习一些研究该问题的基本方法。

2 马尔可夫链基本定理

2.1 平稳分布的存在性

我们将证明，对于每个有限的马尔可夫链 P，总存在某个 π 使得 $\pi^\top P = \pi^\top$。注意，这等价于“1 是 $P^\top$ 的一个特征值，并且它有一个非负特征向量（$P^\top\pi = \pi$）”。

这里要求 π 非负即可，因为我们总是可以把它除掉 $\|\pi\|_1$ 之后变成一个分布。

我们首先注意到，矩阵 P 满足 $P\mathbf{1} = \mathbf{1}$，即 1 是 P 的特征值，而 P 与 $P^\top$ 有同样的特征多项式，因此，1 也是 $P^\top$ 的特征值。于是，我们可以找到一个向量 $\mathbf{v}$，满足 $P^\top\mathbf{v} = \mathbf{v}$。但是，这个 $\mathbf{v}$ 并不一定是非负的，我们现在说明，如果我们定义 $\pi(i) = |\mathbf{v}(i)|$，那么 π 是 $P^\top$ 对应于 1 的一个特征向量。

这是由于对于任何 i，$\sum_{j\in[N]} P(i \to j) = 1$。

对于任何 $i \in [N]$，我们可以验证，

$$\pi(i) = |\mathbf{v}(i)| = \left|\sum_{j\in[N]} \mathbf{v}(j)\cdot P(j \to i)\right| \le \sum_{j\in[N]} |\mathbf{v}(j)|\cdot P(j \to i) = \sum_{j\in[N]} \pi(i)\cdot P(j \to i).$$

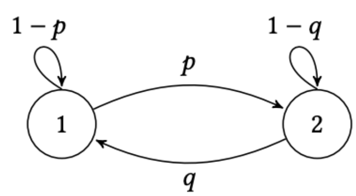
我们只需要说明，对于每一个 i，上面式子中的 $\le$ 都必须取到等号即可。我们用反证法先假设某一个 i 没有取到等号，那么对所有 $\mathbf{v}(i)$ 求和，有

$$\begin{aligned}\left|\sum_{i\in[N]} |\mathbf{v}(i)|\right| &< \left|\sum_{i\in[N]}\sum_{j\in[N]} |\mathbf{v}(j)|\cdot P(j \to i)\right| \\ &= \left|\sum_{j\in[N]} |\mathbf{v}(j)|\cdot \sum_{i\in[N]} P(j \to i)\right| \\ (\textstyle\sum_{i\in[N]} P(j\to i) = 1) \qquad &= \left|\sum_{j\in[N]} |\mathbf{v}(j)|\right|.\end{aligned}$$

但这显然是矛盾的，因为上述式子的头和尾是同一个东西。因此，π 是 $P^\top$ 的一个非负的特征向量。于是，$\frac{\pi}{\|\pi\|_1}$ 是马尔可夫链 P 的一个平稳分布。

2.2 唯一性与收敛性

我们接着来讨论平稳分布的唯一性，以及在已知平稳分布唯一的场合下，是否能够从任意分布出发收敛到它。我们从非平凡的最简单的马尔可夫链，也就是只有两个状态的马尔可夫链出发来研究这个问题。所有的两个状态的马尔可夫链都可以被两个参数 $p, q \in [0,1]$ 来描述。



很明显，该马尔可夫链的转移矩阵为 $P = \begin{bmatrix} 1-p & p \\ q & 1-q \end{bmatrix}$。并且，容易验证 $\pi = \left(\frac{q}{p+q}, \frac{p}{p+q}\right)^\top$ 是 P 的一个平稳分布。我们将验证是否从任意初始分布 μ_0 出发，分布 μ_t 总是收敛到 π。一般来说，分布的收敛可以有很多不同的定义，在我们的例子里，由于分布只有两个维度，并且两维之和等于 1，因此我们只需检查第一维是否收敛，即

$$\lim_{t\to\infty} \left|\mu_0^\top P^t(1) - \pi(1)\right| \to 0$$

是否成立。现在我们定义 $\Delta_t := |\mu_t(1) - \pi(1)|$，并研究其如何随着 t 变化。根据 $\mu_t^\top = \mu_{t-1}^\top P$，我们有

$$\begin{aligned}
\Delta_t &= \left|\mu_{t-1}^T \cdot P(1) - \pi(1)\right| \\
&= \left|(1-p)\cdot\mu_{t-1}(1) + q\cdot(1-\mu_{t-1}(1)) - \frac{q}{p+q}\right| \\
&= \left|(1-p-q)\cdot\mu_{t-1}(1) + q\cdot\left(1-\frac{1}{p+q}\right)\right| \\
&= |1-p-q|\cdot\Delta_{t-1}.
\end{aligned}$$

因此可以看出，除了下面两种情况之外，$\Delta_t \to 0$ 总成立：

- $p = q = 0$；
- $p = q = 1$。

事实上，这两种情况分别对应了两种不收敛的原因，我们分别来讨论。首先考虑 $p = q = 0$ 的情况。此时马尔可夫链如下：

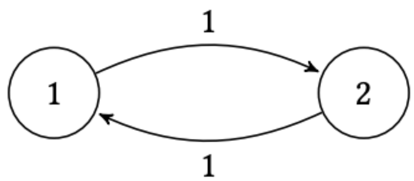
这个马尔可夫链的转移图是不连通的，因此可以划分为两个不相交的子图，每个子图仍然是一个马尔可夫链，并且各自都有自己的平稳分布。稍微思考一下可以发现，这些子分布的任何混合（mixture）都是整个马尔可夫链的平稳分布。因此，在这种情况下平稳分布不是唯一的。我们想把这种平稳分布不唯一的原因进行推广，便促使我们给出如下定义：

值得注意的是，不可约并不是具有唯一平稳分布的必要条件。考虑 $p = 1, q = 0$ 的情况，这个马尔可夫链具有唯一的平稳分布 $(0, 1)^\top$。你能根据这个例子想到平稳分布唯一的充分必要条件是什么？可以回忆一下算法课学过的对于有向图的强连通分量的有向无环图分解。

定义 7 (可约与不可约). *如果一个有限马尔可夫链的转移图是强连通的，我们称该马尔可夫链是***不可约***的。如果转移图不是强连通的，我们称其为***可约***的。*

我们未来会说明，不可约性是具有唯一平稳分布的充分条件。

我们接着来考察 $p = q = 1$ 时会发生什么。这个时候马尔可夫链如下：



这个马尔可夫链的状态转移图是二分图。易见 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 是其唯一的平稳分布。然而，对于初始分布 $\mu_0 = (1, 0)^\top$，可以看到 μ_t 在 $(1, 0)^\top$ 和 $(0, 1)^\top$ 之间振荡。因此，它并不总是收敛到平稳分布。我们来推广这种 "振荡" 的概念。

对于一个马尔可夫链的状态 i，我们用 C_i 来表示包含 i 的所有有向环的集合。

这儿对于一个集合 $S \subseteq \mathbb{N}$，$\gcd(S)$ 表示的是 S 中数的最大公约数。

定义 8 (周期性与无周期性). *如果对于马尔可夫链的一个状态 i，满足*

$$\gcd(\{|c| : c \in C_i\}) = 1,$$

*那么我们就称 i 是***无周期性（aperiodic）***的，否则，就称它为***周期性（periodic）***的。如果一个马尔可夫链中的每一个状态都是无周期性的，则称该马尔可夫链是无周期性的。*

我们应该这样来理解周期性的定义。假设一个包含点 i 的所有有向环长度的最大公约数比如是 3，那么说明，我们从 i 出发，一定只有在 3 的倍数步之后，才可能回到 i。这个性质，便推广了我们在两个点的例子里面提到的循环振荡的现象。

有了这两个定义，我们可以给出第一个关于马尔可夫链的重要定理，它被称为马尔可夫链基本定理（Fundamental theorem of Markov chains，FTMC）。

这里的收敛我们理解为逐点收敛，即对于每一个 $i \in [N]$，$\lim_{t\to\infty} (\mu^\top P^t)(i) = \pi(i)$。

定理 9 (马尔可夫链基本定理)**.** *如果有限马尔可夫链 $P \in \mathbb{R}^{N\times N}$ 是**不可约且无周期性**的，那么它有**唯一**的平稳分布 $\pi \in \mathbb{R}^N$，并且对于**任意**分布 $\mu \in \mathbb{R}^N$，*

$$\lim_{t\to\infty} \mu^\top P^t = \pi^\top.$$

我们会在下节课来证明这个定理。

3 可逆链与 Metropolis-Hastings 算法

我们前面提到了 MCMC 算法，也就是说给定一个目标分布 π，希望能够设计一个马尔可夫链，使得通过模拟它，最终能够从 π 中进行采样。Metropolis-Hastings 算法就是一个实现这个目标的算法。在介绍它之前，我们首先介绍可逆马尔可夫链。

3.1 可逆（Reversible）马尔可夫链

一个定义在状态空间 $[N]$ 上的马尔可夫链 P 被称为（时间）*可逆的*，如果存在某个分布 π 满足

$$\forall i, j \in [N],\ \pi(i)P(i,j) = \pi(j)P(j,i)$$

这一组等式称为*细致平衡条件*（detailed balance conditions）。我们可以直接从定义进行验证，分布 π 必须是 P 的平稳分布：

$$\left[\pi^\top P\right](j) = \sum_{i\in[N]} \pi(i)P(i,j) = \sum_{i\in[N]} \pi(j)P(j,i) = \pi(j).$$

“可逆” 这一名称来源于这样一个事实：如果从平稳分布出发，任何遵循该链的变量序列 $X_0, X_1, \ldots, X_t$ 的分布，即 $(X_0, X_1, \ldots, X_{t-1}, X_t)$ 的分布与 $(X_t, X_{t-1}, \ldots, X_1, X_0)$ 的分布是相同的。换句话说，对于所有 $x_0, x_1, \ldots, x_t \in [N]$，

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}\left[X_0 = x_0, X_1 = x_1, \ldots, X_t = x_t\right] &= \pi(x_0)P(x_0, x_1)\cdots P(x_{t-1}, x_t) \\
&= \pi(x_t)P(x_t, x_{t-1})\cdots P(x_1, x_0) \\
&= \mathbb{P}\left[X_0 = x_t, X_1 = x_{t-1}, \ldots, X_t = x_0\right].
\end{aligned}$$

显然，可逆的链是一类特殊的链，但它的表达能力也足够强大，能够满足我们大部分的要求。并且，它的特殊性在于其转移矩阵在某种意义上是*对称的*，因此许多线性代数中的强

有力工具都可以用来研究它。我们也可能够很快的验证一个分布是不是给定链的平稳分布——只需验证细致平衡条件即可。我们下面来看两个例子。

示例 10. 考虑在一个 N 个顶点的连通的 d-正则的无向图上进行随机游走。在这个图上，每一个顶点均正好有 d 个邻居，游走的每一步均是等概率的选择一个邻居走过去。那么均匀分布 π 是这个随机游走的一个平稳分布。我们直接来考察细致平衡条件。对于两个不同的点 i, j，如果它们不相邻，那么细致平衡条件的左右两边都是零，自然成立。否则

$$\pi(i) \cdot P(i \to j) = \frac{1}{N} \cdot \frac{1}{d} = \pi(j) \cdot P(j \to i).$$

我们经常会说对于某一个 $i \in \Omega$，Ω 上的分布 μ 满足 $\mu(i) \propto w(i)$，即 $\mu(i)$ 正比于 $w(i)$，也就是说 $\mu(i) = \frac{w(i)}{\sum_{j\in\Omega} w(j)}$。这里 $\forall i$，$w(i) \geq 0$ 是一个权重函数。

示例 11. 在上面的例子里，如果这个图的 N 个顶点的度数分别是 $d_1, \ldots, d_N$，那么对于同样的随机游走（每次均匀选一个邻居走过去），它的平稳分布是对于每一个 i，$\pi(i) \propto d_i$。为了验证这个，我们检查细致平衡条件。对于相邻的 i, j，我们有

$$\pi(i) \cdot P(i \to j) = \frac{d_i}{Z} \cdot \frac{1}{d_i} = \frac{1}{Z} = \frac{d_j}{Z} \cdot \frac{1}{d_j} = \pi(j) \cdot P(j \to i),$$

这儿 $Z := \sum_i d_i$ 是归一化常数。

回忆有限状态马尔可夫链基本定理需要的两个条件：不可约性和非周期性。对于可逆链，其转移图是无向图（但每条边两个方向的权重不一样），因此不可约性等价于转移图的连通性。而无周期性则等价于图不是二分图。

实际上，对于可逆链，边 (i, j) 的权重的正确看法是定义为 $\pi(i) \cdot P(i \to j)$。根据细致平衡条件，(i, j) 的权重和 (j, i) 的权重是一样的。这样，就真的是无向图了。

3.2 Metropolis-Hastings 算法

给定状态空间 Ω 上的分布 π，我们如何设计一个马尔可夫链 P，使得 π 是 P 的平稳分布？Metropolis-Hastings 算法提供了一种方法，只要转移图 G 是连通的且无向的。

Metropolis-Hastings 算法构造的马尔可夫链一定是可逆的，它首先给定任意一个连通的无向图作为转移图。设 Δ 为转移图中除自环外的最大度数（即 $\Delta := \max_{i\in[N]} \sum_{j\neq i\in[N]} \mathbb{1}[\{i, j\} \in E]$）。我们描述以下构造转移矩阵 P 的过程：均匀随机地选择 $k \in [\Delta + 1]$。对于任意 $i \in [N]$，设 $\{j_1, j_2, \ldots, j_d\}$ 为 i 的 d 个邻居。我们考虑状态 i 的转移：

- 如果 $d + 1 \leq k \leq \Delta + 1$，则什么也不做；
- 如果 $k \leq d$，
  - 提议从 i 移动到 j_k；
  - 以概率 $\min\left\{\frac{\pi(j_k)}{\pi(i)}, 1\right\}$ 接受该提议。

于是转移矩阵 P 为

$$\forall i,j\in[N],\ P(i,j)=\begin{cases}\frac{1}{\Delta+1}\min\left\{\frac{\pi(j)}{\pi(i)},1\right\}, & \text{若} i\neq j \text{ 且} i,j\text{相邻};\\ 1-\sum_{k\neq i}P(i,k), & \text{若} i=j.\end{cases}$$

我们可以验证，P 对于 π 是可逆的：

$$\forall i,j\in\Omega:\ \pi(i)P(i,j)=\pi(i)\cdot\frac{1}{\Delta+1}\min\left\{\frac{\pi(j)}{\pi(i)},1\right\}=\frac{\min\{\pi(i),\pi(j)\}}{\Delta+1}=\pi(j)P(j,i).$$

注意到，由于每一个点上均有自环，所以我们构造出来的 P 是不可约且无周期性的。因此，根据定理 9，从任意初始状态出发，通过不停的模拟 P，分布均能够收敛到 π。

Metropolis-Hastings 算法的一个很重要的好处在于我们并不需要知道 π 就能实现该算法，我们只需要知道 $\frac{\pi(j)}{\pi(i)}$ 这一量的值。而这一个量在许多应用中更容易计算。比如说，我们知道每一个状态 i 都有一个权重 $w(i)\geq 0$，并且想要的分布是 $\pi(i)\propto w(i)$，那么 $\frac{\pi(i)}{\pi(j)}=\frac{w(i)}{w(j)}$，我们并不需要去计算归一化常数 $\sum_j w(j)$。

示例 12. 我们通过一个简单的例子来展示该算法的工作原理。考虑一个有 3 个顶点 $\{a,b,c\}$ 的图。顶点之间有无向边 (a,b)、(b,c) 和 (a,c)，每个顶点都有自环。在这种情况下，$\Delta=2$。如果我们希望设计一个具有平稳分布 $(\frac{1}{2},\frac{1}{3},\frac{1}{6})$ 的转移矩阵 P，根据 *Metropolis* 算法，我们有：

$$\begin{aligned}P(a,b)&=\frac{1}{2+1}\cdot\frac{2}{3}=\frac{2}{9},\\ P(a,c)&=\frac{1}{2+1}\cdot\frac{1}{3}=\frac{1}{9},\\ P(a,a)&=1-\frac{1}{9}-\frac{2}{9}=\frac{2}{3}.\end{aligned}$$

大家可以类似的得出从 b 出发以及从 c 出发的权重。