实用随机过程

胡太忠
thu@ustc.edu.cn

安徽 合肥 中国科学技术大学

2024 年 2 月

第 4 章　Markov 链

- 基本概念
- 状态分类
- 极限性质（更新过程的应用）
- 半马氏过程

过程 $\{X(t), t \in \Gamma\}$, $\Gamma \subseteq \mathbb{R}$, 状态空间 S.

- Markov 性质: 对 $\forall\ t_1 < t_2 < \cdots < t_n < t$, $t_i, t \in \Gamma$, $x_i \in S$, $B \in \mathcal{B}(S)$,

$$\mathrm{P}\left(X(t) \in B \mid X(t_1) = x_1, \ldots, X(t_{n-1}) = x_{n-1}, X(t_n) = x_n\right)$$
$$= \mathrm{P}\left(X(t) \in B | X(t_n) = x_n\right).$$

- 时间齐次性: 对 $\forall\ t_0 < t$, $t_0, t \in \Gamma$, $x \in S$, $B \in \mathcal{B}(S)$,

$$\mathrm{P}\left(X(t) \in B | X(t_0) = x\right) \text{ 与 } t_0 \text{ 无关，只依赖于 } t - t_0.$$

- 分类: 根据 Γ 与 S “离散” 与 “连续” 进行分类

研究离散时间离散状态时间齐次的马氏链 (Markov Chain, 记为 MC) $\{X_n, n \in \Gamma\}$, $\Gamma = \{0, 1, 2, \ldots\}$, $S = \{0, 1, 2, \ldots\}$ 或有限状态.

- 局部历史和全部历史的马氏性
- 一步转移概率:

$$P_{ij} = \mathrm{P}(X_1 = j | X_0 = i) = \mathrm{P}(X_{n+1} = j | X_n = i), \quad \forall\, i, j, n$$

- 一步转移概率矩阵:

$$\mathbf{P} = \left(P_{ij}\right)_{S \times S}$$

注

$\{X_n, n \geq 0\}$ 概率规律由 X_0 分布和转移概率矩阵 $\mathbf{P}$ 唯一确定.

- 【例 4.1(C)】 一般随机游动过程 $\{S_n, n \geq 0\}$, 其中 $S_0 = 0$, $S_n = \sum_{i=1}^{n} X_i$, $n \geq 1$, 设 $\{X_n, n \geq 0\}$ iid,

$$\mathrm{P}\left(X_1 = j\right) = \alpha_j, \quad j \in \mathbb{Z} \equiv \{0, \pm 1, \pm 2, \ldots\},$$

显然，$\{S_n, n \geq 0\}$ 为一个 MC, 转移概率

$$P_{ij} = \alpha_{j-i}, \quad \forall\ i, j \in \mathbb{Z}.$$

- 【例 4.1(D)】 简单随机游动过程 $\{S_n, n \geq 0\}$, 其中 $S_0 = 0$,

$S_n = \sum_{i=1}^{n} X_i$, $n \geq 1$, 设 $\{X_n, n \geq 0\}$ iid,

$$\mathrm{P}\left(X_1 = 1\right) = p, \quad \mathrm{P}\left(X_1 = -1\right) = 1 - p = q.$$

证明：$\{|S_n|, n \geq 0\}$ 为一个 MC.

(续)

▶ 引理 4.1.1 设 $\{S_n, n \geq 0\}$ 为简单随机游动, 则对任意 $i \neq 0$,

$$\mathrm{P}\left(S_n = i \;\middle|\; |S_n| = i, |S_{n-1}| = i_{n-1}, \ldots, |S_1| = i_1\right) = \frac{p^i}{p^i + q^i}. \qquad (*.1)$$

证明: 约定 $i_0 = 0$, 定义 $j = \max\{k : \ i_k = 0, 0 \leq k \leq n\}$.

- 事件 $\{S_n = i, |S_{n-1}| = i_{n-1}, \ldots, |S_j| = 0\}$ 对应的路径向右跳 $\frac{1}{2}(n-j+i)$ 步, 向左跳 $\frac{1}{2}(n-j-i)$ 步;
- 事件 $\{S_n = -i, |S_{n-1}| = i_{n-1}, \ldots, |S_j| = 0\}$ 对应的路径向右跳 $\frac{1}{2}(n-j-i)$ 步, 向左跳 $\frac{1}{2}(n-j+i)$ 步.

于是 $(*.1)$ 左边等于

$$\mathrm{P}\left(S_n = i \;\middle|\; |S_n| = i, |S_{n-1}| = i_{n-1}, \ldots, |S_j| = 0\right) = \frac{p^i}{p^i + q^i}.$$

(续) 证明 $\{|S_n|, n \geq 0\}$ 为一个 MC.

证明： 对 $\forall\ i \neq 0$,

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{P}\left(|S_{n+1}| = i+1 \;\middle|\; |S_n| = i, |S_{n-1}| = i_{n-1}, \ldots, |S_1| = i_1\right) \\
&\quad = \mathrm{P}\left(|S_{n+1}| = i+1 \;\middle|\; S_n = i, |S_{n-1}| = i_{n-1}, \ldots, |S_1| = i_1\right) \\
&\qquad \times \mathrm{P}\left(S_n = i \;\middle|\; |S_n| = i, |S_{n-1}| = i_{n-1}, \ldots, |S_1| = i_1\right) \\
&\quad\; + \mathrm{P}\left(|S_{n+1}| = i+1 \;\middle|\; S_n = -i, |S_{n-1}| = i_{n-1}, \ldots, |S_1| = i_1\right) \\
&\qquad \times \mathrm{P}\left(S_n = -i \;\middle|\; |S_n| = i, |S_{n-1}| = i_{n-1}, \ldots, |S_1| = i_1\right) \\
&= p \cdot \frac{p^i}{p^i + q^i} + q \cdot \frac{q^i}{p^i + q^i}.
\end{aligned}
$$

于是，转移概率为: $P_{01} = 1$, $P_{ij} = 0, \forall\ |i-j| > 1$, 且

$$
P_{i,i+1} = \frac{p^{i+1} + q^{i+1}}{p^i + q^i} = 1 - P_{i,i-1}. \quad \blacksquare
$$

- n 步转移概率：

$$P_{ij}^n = \mathrm{P}(X_n = j | X_0 = i), \quad \forall\, i, j$$

- n-步转移概率矩阵：

$$\mathbf{P}^{(n)} = \left(P_{ij}^n\right)_{S\times S}$$

- Chapman-Kolmogorov 方程： 对 $\forall\ m, n \geq 0$,

$$P_{ij}^{m+n} = \sum_{k=0}^{\infty} P_{ik}^n P_{kj}^m, \quad \forall\ i, j,$$

即 $\mathbf{P}^{(m+n)} = \mathbf{P}^{(m)}\mathbf{P}^{(n)}$, 其中约定 $P_{ik}^0 = \delta_{ik}$. 因此,

$$\mathbf{P}^{(n)} = \mathbf{P}\cdot\mathbf{P}^{(n-1)} = \mathbf{P}^n, \quad \forall\ n \geq 1.$$

- 定义 4.2.1

  (1) $i \to j$ (状态 j 可由状态 i 到达)，若存在 $n \geq 0$, 使得 $P_{ij}^{n} > 0$.

  (2) $i \longleftrightarrow j$ （状态 i, j 互达），若 $i \to j, j \to i$.

- 性质 4.2.1

$$i \to j,\ j \to k \implies i \to k.$$

- 等价关系： $\longleftrightarrow$ 是一个等价关系：

  (1) $i \longleftrightarrow i$;

  (2) $i \longleftrightarrow j \implies j \longleftrightarrow i$;

  (3) $i \longleftrightarrow j, j \longleftrightarrow k \implies i \longleftrightarrow k$.

※ 状态空间 S 可分为有限或无限可列个互不相交的子类，每一子类的状态互达，形如

$$C(j) = \{k : \ k \longleftrightarrow j, k \in S\}.$$

- 定义 4.2.2
  - MC 称为不可约的 (irreducible), 若 S 只能分解为一个类.
  - 一个类 C 称为闭的，若对 $\forall\, j \in C, \forall\, k \notin C$, 则 $P_{jk}^n = 0, \forall\, n \geq 0$; 即一个 MC 一旦进入子类 C 就不再出来.
  - 状态 i 的周期为 d: $d \geq 1$ 且 d 是所有满足 $P_{ii}^n > 0$ 的 n 的最大公约数.

    记号：$d = d(i)$

    周期为 1 的状态称为非周期的.

    若 $P_{ii}^n = 0, \forall\, n > 0$, 则约定 $d(i) = +\infty$.
- 命题 4.2.2 (周期是类性) 若 $i \longleftrightarrow j$, 则 $d(i) = d(j)$.

考虑 MC $\{X_n, n \geq 0\}$, 定义

$$N_k(n) = \#\{\nu :\ X_\nu = k, 1 \leq \nu \leq n\}, \quad \forall\ n \geq 1,$$

即 $N_k(n)$ 表示前 n 步状态转移访问状态 k 的次数. 再定义

$$f_{jk} = \mathrm{P}\left(N_k(\infty) > 0 \,|\, X_0 = j\right), \tag{$*$.2}$$

$$g_{jk} = \mathrm{P}\left(N_k(\infty) = \infty \,|\, X_0 = j\right), \tag{$*$.3}$$

f_{jk} 表示给定过程初始状态为 j, 过程最终能够访问状态 k 的概率;
g_{jk} 表示给定过程初始状态为 j, 过程能够无穷多次访问状态 k 的概率.

定义

$$f_{jk}^0 = 0, \quad \forall\ j, k;$$

$$f_{jk}^n = \mathrm{P}\left(X_n = k,\ X_\nu \neq k, \nu = 1, \ldots, n-1 \,|\, X_0 = j\right), \quad n \geq 1.$$

- 性质 4.2.2

$$f_{jk}=\sum_{n=1}^{\infty}f_{jk}^{n},\qquad P_{jk}^{n}=\sum_{m=1}^{n}f_{jk}^{m}P_{kk}^{n-m},\quad \forall\ j,k.$$

证明： 定义首达时

$$T_{jk}=\min\{n:\ X_n=k,X_{n-1}\neq k,\ldots,X_1\neq k|X_0=j\}.$$

- 性质 4.2.3

$$g_{jk}=f_{jk}g_{kk},\qquad g_{kk}=\lim_{n\to\infty}(f_{kk})^{n}.$$

证明： (1)

$$\begin{aligned}
g_{jk} &= \mathrm{P}\left(N_k(\infty)=\infty|X_0=j\right)=\sum_{m=1}^{\infty}\mathrm{P}\left(N_k(\infty)=\infty,\ T_{jk}=m|X_0=j\right)\\
&= \sum_{m=1}^{\infty}\mathrm{P}\left(N_k(\infty)-N_k(m)=\infty|X_m=k\right)\cdot f_{jk}^{m}\\
&= \sum_{m=1}^{\infty}g_{kk}\cdot f_{jk}^{m}=f_{jk}g_{kk}.
\end{aligned}$$

(续)

(2) 对 T_{kk} 取条件，

$$\begin{aligned}
\mathrm{P}\left(N_k(\infty) \geq n | X_0 = k\right) &= \sum_{m=1}^{\infty} \mathrm{P}\left(N_k(\infty) - N_k(m) \geq n-1 | T_{kk} = m\right) \cdot f_{kk}^m \\
&= \sum_{m=1}^{\infty} \mathrm{P}\left(N_k(\infty) - N_k(m) \geq n-1 | X_m = k\right) \cdot f_{kk}^m \\
&= \sum_{m=1}^{\infty} \mathrm{P}\left(N_k(\infty) \geq n-1 | X_0 = k\right) \cdot f_{kk}^m \\
&= \mathrm{P}\left(N_k(\infty) \geq n-1 | X_0 = k\right) \cdot f_{kk} \\
&= \left(f_{kk}\right)^n .
\end{aligned}$$

$$\Longrightarrow g_{kk} = \lim_{n\to\infty} \mathrm{P}\left(N_k(\infty) \geq n | X_0 = k\right) = \lim_{n\to\infty} (f_{kk})^n . \quad \blacksquare$$

- **性质 4.2.4** 对任意状态 k, $g_{kk}=1$ 或 $g_{kk}=0$. 进一步，有

$$g_{kk}=1 \iff f_{kk}=1,$$
$$g_{kk}=0 \iff f_{kk}<1.$$

- **定义 4.2.3**
  - 一个状态 j 称为常返的 (Recurrent), 若 $f_{jj}=1$.
  - 一个状态 j 称为非常返的或滑过的 (Transient), 若 $f_{jj}<1$.

※
(1) 有限状态 MC 其所有状态不可能都是滑过的，必有常返态.
(2) $f_{jk}>0 \implies j\to k$.

为判断一个状态是否为常返，我们研究两个 pgf 之间的关系. 定义

$$
\begin{aligned}
P_{jk}(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} P_{jk}^n z^n = \delta_{jk} + \sum_{n=1}^{\infty} P_{jk}^n z^n, \\
F_{jk}(z) &= \sum_{n=1}^{\infty} f_{jk}^n z^n, \quad |z| < 1.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
P_{jk}(z) &\longleftarrow \{P_{jk}^n, n \geq 0\} \\
F_{jk}(z) &\longleftarrow \{f_{jk}^n, n \geq 0\}
\end{aligned}
$$

- 引理 4.2.1 对任意状态 j 和 k, 当 $|z|<1$ 时，有

$$P_{jk}(z)=F_{jk}(z)P_{kk}(z), \quad j\neq k,$$

$$P_{kk}(z)=1+F_{kk}(z)P_{kk}(z),$$

$$P_{kk}(z)=\frac{1}{1-F_{kk}(z)}, \qquad F_{kk}=1-\frac{1}{P_{kk}(z)}.$$

证明：

$$\begin{aligned}
P_{jk}(z) &= \delta_{jk}+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\sum_{m=1}^{n} f_{jk}^{m}P_{kk}^{n-m}\right)z^{n}\\
&= \delta_{jk}+\sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=m}^{\infty} f_{jk}^{m}z^{m}\cdot P_{kk}^{n-m}z^{n-m}\\
&= \delta_{jk}+F_{jk}(z)P_{kk}(z), \quad |z|<1.
\end{aligned}$$

- 命题 4.2.3

$$f_{kk}=1 \iff \sum_{n=1}^{\infty} P_{kk}^{n}=\infty;$$

$$f_{kk}<1 \iff \sum_{n=1}^{\infty} P_{kk}^{n}<\infty.$$

※ Abel 定理： 设幂级数 $\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$ 的收敛半径为 $R>0$. 如果当 $x=R$（或 $x=-R$）时级数收敛，则和函数 $S(x)$ 于 $x=R$（或 $x=-R$）点为左连续（右连续）.

证：

$$\begin{aligned} f_{kk}<1 &\iff \sum_{n=1}^{\infty} f_{kk}^{n}<1 \overset{\text{Abel 定理}}{\iff} \lim_{z\to 1^-} F_{kk}(z)=f_{kk}<1 \\ &\iff \lim_{z\to 1^-} P_{kk}(z)=P_{kk}(1)<\infty \\ &\overset{\text{Abel 定理}}{\iff} \sum_{n=1}^{\infty} P_{kk}^{n}<\infty. \end{aligned}$$

- 命题 4.2.4

(1) 设 i 为常返态，$i \longleftrightarrow j$, 则 j 为常返态.

(2) 设 i 为非常返态，$i \longleftrightarrow j$, 则 j 为非常返态.

证： 由 $i \longleftrightarrow j$ 知存在 m, n 使得 $P_{ij}^{m} > 0$, $P_{ji}^{n} > 0$, 于是

$$P_{jj}^{n+k+m} \geq P_{ji}^{n} P_{ii}^{k} P_{ij}^{m}, \quad \forall k.$$

因此，

$$\sum_{k=1}^{\infty} P_{jj}^{k} \geq \sum_{k=1}^{\infty} P_{jj}^{n+k+m} \geq P_{ji}^{n} P_{ij}^{m} \sum_{k=1}^{\infty} P_{ii}^{k} = \infty.$$

※ 常返性和非常返性皆为类性.

- 命题 4.2.5 设 $k \neq j$, $k \longrightarrow j$ 且 $f_{kk} = 1$, 则 $j \longleftrightarrow k$, $f_{jk} = 1$.

证： 注意对于 $\forall\ n \geq 1$，有

$$g_{kk} = \sum_{i \in S} P_{ki}^{n}\, g_{ik},$$

进而，

$$1 - g_{kk} = \sum_{i \in S} P_{ki}^{n}(1 - g_{ik}).$$

由 $f_{kk} = 1$ 得 $g_{kk=1}$. 于是，

$$P_{ki}^{n}(1 - g_{ik}) = 0, \quad \forall\ n \geq 1,\ i \in S. \tag{$*$.4}$$

再由 $k \longrightarrow j$ 知存在 $n_0 \geq 1$ 使得 $P_{kj}^{n_0} > 0$. 在 $(*.4)$ 中令 $n = n_0$ 得

$$g_{jk} = 1.$$

因此，$f_{jk} = 1$. ∎

- 命题 4.2.6

(1) 一个常返类一定是闭的;

(2) 一个闭的非常返类一定含有无穷多个状态.

- 命题 4.2.7 设 C 为一个闭类, $k \in C$, 则

$$C \text{ 为常返类} \Longleftrightarrow f_{jk} = 1,\ \forall\, j \in C, j \neq k.$$

证明: $(\Longrightarrow)$ $\surd$

$(\Longleftarrow)$

$$f_{kk} = P_{kk} + \sum_{j \in C, j \neq k} P_{kj} f_{jk} = \sum_{j \in C} P_{kj} = \sum_{j \in S} P_{kj} = 1. \quad \blacksquare$$

※ 一个类只能为如下三者之一:

闭的常返类; 闭的非常返类; 非闭的非常返类.

- 【例 4.2 (A)】 简单随机游动过程 $\{S_n, n \geq 0\}$, 其中 $S_0 = 0$, $S_n = \sum_{i=1}^{n} X_i$, $n \geq 1$, 设 $\{X_n, n \geq 0\}$ iid,

$$\mathrm{P}\left(X_1 = 1\right) = p, \quad \mathrm{P}\left(X_1 = -1\right) = 1 - p = q,$$

则 $\{S_n\}$ 为不可约 MC, $d(0) = 2$, 转移概率 $P_{i,i+1} = p = 1 - P_{i,i-1}$, $\forall\ i$. 易知

$$P_{00}^{2n} = \binom{2n}{n} p^n q^n \sim \frac{(4pq)^n}{\sqrt{2\pi n}},$$

所以,

$$\sum_{n=1}^{\infty} P_{00}^{n} < \infty \iff \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(4pq)^n}{\sqrt{2\pi n}} < \infty \iff p \neq \frac{1}{2}.$$

因此，当 $p = 1/2$ 时，0 为常返态. ∎

※ 守株待兔 缘木求鱼

- **习题** 证明：对任意状态 i,j,k，有 $f_{ik} \geq f_{ij}f_{jk}$.

证：记

$$f_{ijk} = \mathrm{P}\,(\text{存在 } n < m \text{ 使 } X_n = j, X_m = k \mid X_0 = i\},$$

$$f_{ijk}^{n,m} = \mathrm{P}\,(X_m\!=\!k; X_\ell \neq k, n\!+\!1 \leq \ell < m; X_n = j; X_\nu \neq j, 1 \leq \nu < n \mid X_0 = i),$$

则

$$f_{ijk} = \sum_{1\leq n<m} f_{ijk}^{n,m}, \qquad f_{ijk}^{n,m} = f_{ij}^{n} f_{jk}^{m-n}.$$

于是，

$$f_{ik} \geq f_{ijk} = \sum_{1\leq n<m} f_{ij}^{n} f_{jk}^{m-n} = \sum_{n=1}^{\infty} f_{ij}^{n} \sum_{m=n+1}^{\infty} f_{jk}^{m-n} = f_{ij}f_{jk}.$$

考虑 MC $\{X_n, n \geq 0\}$, 定义

$$N_j(n) = \#\{\nu: \ X_\nu = j, 1 \leq \nu \leq n\}, \quad \forall\ n \geq 1,$$

即 $N_j(n)$ 表示前 n 步状态转移访问状态 j 的次数.

- 若 j 为常返态，且 $X_0 = j$, 则 $\{N_j(n), n \geq 1\}$ 为更新过程，更新间隔时间分布为 $\{f_{jj}^n, n \geq 1\}$;
- 若 j 为常返态，$i \longleftrightarrow j$, 且 $X_0 = i$, 则 $\{N_j(n), n \geq 1\}$ 为延迟更新过程，首次更新到达时布为 $\{f_{ij}^n, n \geq 1\}$;
- 若 j 为非常返态，则 $\sum_{n=1}^{\infty} P_{ij}^n < \infty, \forall\ i$. 从而，$P_{ij}^n \to 0$, $n \to \infty$.

※ 本节目的：求 $\lim_{n\to\infty} P_{ij}^n$.

- 记号

$$T_{jj} = \text{过程从状态 } j \text{ 出发首次返回状态 } j \text{ 所需要的转移步数},$$

$$\mu_{jj} = \mathrm{E}\, T_{jj} = \begin{cases} \infty, & j \text{ 为非常返态}, \\ \sum_{n=1}^{\infty} n f_{jj}^{n}, & j \text{ 为常返态}. \end{cases}$$

- 定义 4.3.1

  设 j 为常返态.

  - 称 j 为正常返的，若 $\mu_{jj} < \infty$;
  - 称 j 为零常返的，若 $\mu_{jj} = \infty$;
  - 称 j 为遍历的，若 j 为正常返且非周期.

- 定理 4.3.1 设 $i \longleftrightarrow j$, 则

(i) $\mathrm{P}\left(\lim_{n\to\infty} \frac{N_j(n)}{n} = \frac{1}{\mu_{jj}} \,\middle|\, X_0 = i\right) = 1$;

(ii) $\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} P_{ij}^{k} = \frac{1}{\mu_{jj}}$;

(iii) 若 j 为非周期的，则 $\lim_{n\to\infty} P_{ij}^{n} = \frac{1}{\mu_{jj}}$;

(iv) 若 j 的周期为 d，则 $\lim_{n\to\infty} P_{jj}^{nd} = \frac{d}{\mu_{jj}}$.

※ 若 j 周期为 $d > 1$, 则 $\lim_{n\to\infty} P_{ij}^{nd} = d/\mu_{jj}$ (X)

反例: 在状态 $0, n$ 带反射壁的简单对称随机游动, 状态空间 $S = \{0, 1, \ldots, n\}$, $P_{01} = 1$, $d(k) = 2$, $k \in S$. 取 $i = 0$, $j = 1$.

▶ 命题 4.3.2 正常返和零常返性为类性.

证明: 设 $i \longleftrightarrow j$ 且 i 为正常返, 即

$$\lim_{n\to\infty} P_{ii}^{nd} = \frac{d}{\mu_{ii}} < \infty, \tag{$*.5$}$$

下证 $\mu_{jj} < \infty$.

由 $i \longleftrightarrow j$ 知存在 $s, t \geq 0$ 使得 $P_{ij}^s > 0$, $P_{ji}^t > 0$, 且 $d(i) = d(j) = d \geq 1$. 显然,

$$P_{jj}^{t+s+\nu d} \geq P_{ji}^t P_{ii}^{\nu d} P_{ij}^s, \quad \forall \nu \geq 1.$$

注意到 $d|(s+t)$, 于是由 $(*.5)$ 知

$$\frac{d}{\mu_{jj}} = \underbrace{\lim_{\nu\to\infty} P_{jj}^{s+t+\nu d}}_{\text{存在性?}} \geq P_{ij}^s P_{ji}^t \cdot \frac{d}{\mu_{ii}} > 0. \quad \blacksquare$$

▶ 定义 4.3.2 一个 pmf $\{\pi_i, i \geq 0\}$ 称为 MC $\{X_n, n \geq 0\}$ 的平稳分布，若

$$\pi_j = \sum_{i=0}^{\infty} \pi_i P_{ij}, \quad \forall\, j. \qquad (*.6)$$

※ 设 X_0 的分布为平稳分布 $\{\pi_i, i \geq 0\}$, 则

- X_n 的分布也为平稳分布，于是

$$\pi_j = \sum_{i=0}^{\infty} \pi_i P_{ij}^n, \quad \forall\, j. \qquad (*.7)$$

- $(X_h, X_{h+1} \ldots, X_{h+n})$ 的分布与 h 无关. 此时，$\{X_n, n \geq 0\}$ 为平稳过程.

- 定理 4.3.3 一个不可约非周期的 MC 必属于下述二者之一：

(i) 所有状态滑过或零常返，$P_{ij}^n \to 0, \forall\, i,j$, MC 不存在平稳分布;

(ii) 所有状态正常返，

$$\pi_j = \lim_{n\to\infty} P_{ij}^n > 0, \quad \forall\, i,j.$$

此时，$\{\pi_j, j \geq 0\}$ 是唯一的平稳分布.

证：(1) 假设存在平稳分布 $\{\pi_i^*, i \geq 0\}$, 则

$$\pi_j^* = \sum_{i=0}^{\infty} \pi_i^* P_{ij}^n, \quad \forall\, j.$$

于是，

$$\pi_j^* \leq \sum_{i=0}^{m} \pi_i^* P_{ij}^n + \sum_{k=m+1}^{\infty} \pi_k^* \to 0 \quad (\text{先令 } n \to \infty \text{ 再令 } m \to \infty).$$

(续)

(ii) 由 $1 = \sum_j P_{ij}^n$ 知 $1 \geq \sum_j \pi_j$. 再由

$$P_{ij}^{n+1} = \sum_k P_{ik}^n P_{kj} \overset{n\to\infty}{\Longrightarrow} \pi_j \geq \sum_k \pi_k P_{kj}, \quad \forall j.$$

上不等式中等和严格成立 [反证，若对某个 j 不成立, 则

$$\sum_j \pi_j > \sum_j \sum_k \pi_k P_{kj} = \sum_k \sum_j \pi_k P_{kj} = \sum_k \pi_k,$$

矛盾], 即

$$\pi_j = \sum_k \pi_k P_{kj}, \quad \forall j. \tag{$*$.8}$$

令 $\pi_j^{**} = \pi_j / \sum_k \pi_k$, 则 $\{\pi_j^{**}\}$ 为一个平稳分布.

(续)

(ii) 唯一性. 设 $\{\pi_j^*\}$ 为另一个平稳分布, 下证 $\pi_i = \pi_i^*$, $\forall\ i$. 事实上,

$$\pi_j^* = \sum_k \pi_k^* P_{kj}^n \overset{n\to\infty}{\Longrightarrow} \pi_j^* \geq \sum_k \pi_k^* \pi_j = \pi_j, \quad \forall j.$$

另一方面,

$$\pi_j^* \leq \sum_{k=0}^{m} \pi_k^* P_{kj}^n + \sum_{k=m+1}^{\infty} \pi_k^* \overset{n\to\infty}{\Longrightarrow} \pi_j^* \leq \sum_{k=0}^{m} \pi_k^* \pi_j + \sum_{k=m+1}^{\infty} \pi_k^*$$

$$\overset{m\to\infty}{\Longrightarrow} \pi_j^* \leq \sum_{k=0}^{\infty} \pi_k^* \pi_j = \pi_j, \quad \forall\ j.$$

于是, $\pi_j^* = \pi_j$, $\forall j$. ∎

▶ 注 对于不可约、正常返 (周期或非周期) MC, 存在唯一的 pmf $\{\pi_i\}$ 满足

$$\pi_j = \sum_k \pi_k P_{kj}, \quad \forall j. \tag{*.9}$$

其中

$$\pi_j = \lim_{n\to\infty} \frac{\text{前 } n \text{ 步转移访问状态 } j \text{ 的次数}}{n} = \frac{1}{\mu_{jj}}.$$

证：记 $I_n(i) = 1_{\{X_n=i\}}$, 设 $X_0 = \ell$, 则由更新酬劳过程得 $\pi_j = 1/\mu_{jj}$, 且

$$\begin{aligned}
\pi_j &= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\mathrm{E}\left[\sum_{k=1}^n I_k(j)\right] = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\mathrm{E}\left[\sum_{k=1}^n \sum_i I_{k-1}(i) I_k(j)\right] \\
&= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{k=1}^n \sum_i \mathrm{E}\left[I_{k-1}(i)\right] P_{ij} \geq \sum_i \lim_{n\to\infty}\left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^n \mathrm{E}\left[I_{k-1}(i)\right]\right) P_{ij} \\
&= \sum_i \pi_i P_{ij}.
\end{aligned}$$

(再同前定理 4.3.3(ii) 证明等号成立)

(续) 唯一性及验证 $\sum_{j=0}^{\infty} \pi_j = 1$

不妨设 $S = \{0, 1, \ldots\}$. 显然, $\sum_{j=0}^{\infty} \pi_j \le 1$; $(*.9)$ 解存在.

设 $\{\pi_j^*\}$ 为另一个平稳分布, 下证 $\pi_i = \pi_i^*$, $\forall\, i$. 事实上, $\forall j, \ell$,

$$\pi_j^* = \sum_{k=0}^{\infty} \pi_k^* P_{kj}^{\ell} \Longrightarrow \pi_j^* = \sum_{k=0}^{\infty} \pi_k^* \left(\frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^{n} P_{kj}^{\ell} \right)$$

$$\overset{n\to\infty}{\Longrightarrow} \pi_j^* \ge \sum_{k=0}^{\infty} \pi_k^* \pi_j.$$

另一方面,

$$\pi_j^* = \sum_{k=0}^{m} \pi_k^* \left(\frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^{n} P_{kj}^{\ell} \right) + \sum_{k=m+1}^{\infty} \pi_k^* \overset{n\to\infty}{\Longrightarrow} \pi_j^* \le \sum_{k=0}^{m} \pi_k^* \pi_j + \sum_{k=m+1}^{\infty} \pi_k^*$$

$$\overset{m\to\infty}{\Longrightarrow} \pi_j^* \le \sum_{k=0}^{\infty} \pi_k^* \pi_j = \pi_j, \quad \forall\, j.$$

于是, $\pi_j^* = \pi_j$, $\forall j$. ∎

※ 对于不可约、正常返且周期为 d 的 MC, 取 $\ell = j$, 则

$$\pi_j = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{nd} \sum_{k=1}^{n} P_{jj}^{kd} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{d} P_{jj}^{nd}.$$

$$\Longrightarrow \lim_{n\to\infty} P_{jj}^{nd} = \frac{d}{\mu_{jj}} = d\pi_j, \quad \forall j.$$

- 问题 一赌徒在任一局中以概率 p 赢 1 元，以概率 $q=1-p$ 输 1 元，现有赌金 i 元 $(1 \le i < N)$，问赌徒在输光之前赌金达到过 N 元的概率是多少？假设每局赌博输赢相互独立.

记

$$X_n = \text{在时刻 } n \text{ (第 } n \text{ 局之后) 的赌金}, \quad n \ge 0,$$

则 $\{X_n, n \ge 0\}$ 为一个 MC，其转移概率 $P_{00} = P_{NN} = 1$,

$$P_{j,j+1} = p = 1 - P_{i,i-1}, \quad j = 1, \ldots, N-1.$$

状态空间 $S = \{0, 1, \ldots, N\}$ 分成三类:

$$\underbrace{\{0\}}_{\text{常返类}}, \quad \underbrace{\{1, 2, \ldots, N-1\}}_{\text{非常返类}}, \quad \underbrace{\{N\}}_{\text{常返类}}.$$

(续) 求

$$f_i \equiv f_{i,N} = \mathrm{P}\,(\text{MC 在访问“0”之前先访问“}N\text{”}\,|X_0 = i), \quad 1 \le i \le N.$$

对首局比赛结果取条件，得

$$f_i = pf_{i+1} + qf_{i-1} \Longrightarrow f_{i+1} - f_i = \frac{q}{p}(f_i - f_{i-1}), \quad i = 1, \ldots, N-1$$

$$\Longrightarrow f_i - f_{i-1} = \left(\frac{q}{p}\right)^{i-1} f_1, \quad i = 1, \ldots, N \quad (\text{利用 } f_0 = 0)$$

$$\Longrightarrow f_i = \begin{cases} \frac{1-(q/p)^i}{1-(q/p)^N}, & p \ne 1/2, \\ i/N, & p = 1/2, \end{cases} \quad (\text{利用 } f_N = 1)$$

当 $N \to \infty$ 时，

$$f_i \longrightarrow \begin{cases} 1 - (q/p)^i, & p > 1/2, \\ 0, & p \le 1/2, \end{cases} \quad (\text{说明什么?})$$

(应用) 求 $\mathrm{E}\,B$, 其中

$B \equiv T_{\{0,n\}} =$ 赌金达到 0 或 n 的赌博次数 (给定 $X_0 = i$), $\quad 1 \le i \le n$.

令 Y_n 表示第 n 局的输赢结果, 则

$$B = \min\left\{ m : \sum_{i=1}^{m} Y_i = -i \ \text{ 或 } \ \sum_{i=1}^{m} Y_i = n - i \right\},$$

$$\sum_{i=1}^{B} Y_i = \begin{cases} n - i & \text{概率 } \alpha \\ -i, & \text{概率 } 1-\alpha \end{cases} \Longrightarrow \mathrm{E}\left[\sum_{i=1}^{B} Y_i\right] = n\alpha - i,$$

其中 $\alpha = f_{i,n}$ (定义同前). 又 B 为 $\{Y_i\}$ 的一个停时, 所以

$$\mathrm{E}\,B = \frac{n\alpha - i}{\mathrm{E}\,Y_1} = \frac{1}{2p-1}\left[\frac{n[1-(q/p)^i]}{1-(q/p)^n} - i\right].$$

考虑一个群体的衍化，记 X_n 为第 n 代群体的大小，$n \geq 0$. 每个个体在其生命结束时都会独立地产生后代，产生的后代个体数 Z 的 pmf 为 $\{p_i, i \geq 0\}$. MC $\{X_n, n \geq 0\}$ 称为分支过程.

假设 $X_0 = 1$，记 $\{p_i\}$ 对应的均值为 $\mu = \mathrm{E}\, Z$，则

$$\mathrm{E}\,[X_n] = \mu \mathrm{E}\,[X_{n-1}] = \mu^n.$$

定义 $\pi_0 = \mathrm{P}\,(\text{群体最终灭绝})$，则

$$\pi_0 = \lim_{n\to\infty} \mathrm{P}\,(X_n = 0).$$

对 X_1 取条件得

$$\pi_0 = \sum_{j=1}^{\infty} \mathrm{P}\,(\text{群体最终灭绝} | X_1 = j) \cdot p_j$$

$\Longrightarrow$

$$\pi_0 = \sum_{j=0}^{\infty} p_j \ \pi_0^j.$$

- 问题 寻找 $\pi_0 = 1$ 的充分必要条件
- 定理 4.5.1 设 $p_0 > 0$, $p_0 + p_1 < 1$, 则

(i) π_0 是满足方程

$$\pi_0 = \sum_{j=0}^{\infty} p_j \ \pi_0^j \tag{*.10}$$

的最小正解.

(ii) $\pi_0 = 1 \iff \mu \leq 1$.

证: (1) 首先, $\pi_0 > 0$ 显然, 因为 $\pi_0 \geq p_0 > 0$. 设 $\pi > 0$ 是 $(*.10)$ 的一个解, 下仅证

$$\pi \geq \mathrm{P}\left(X_n = 0\right), \quad \forall\ n \geq 1.$$

利用

$$\mathrm{P}\left(X_{n+1} = 0\right) = \sum_{j=0}^{\infty} \mathrm{P}\left(X_{n+1} = 0 | X_1 = j\right) \cdot p_j = \sum_{j=0}^{\infty} p_j [\mathrm{P}\left(X_n = 0\right)]^j.$$

(续) (ii) 定义函数

$$\phi(s)=\sum_{k=0}^{\infty}p_k s^k,\quad s\in(0,1].$$

易验证: $\phi''(s)>0$, $\phi'(1)=\mu$, $\phi(1)=1$, $\phi(0)=p_0$.

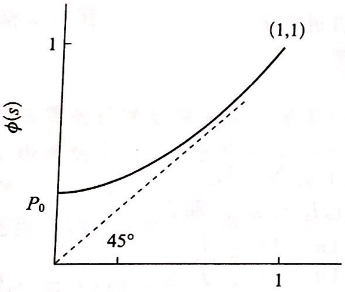

图 4.5.1

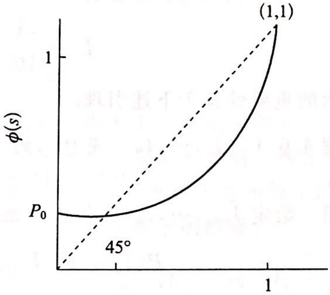

图 4.5.2

- 一个遍历的或不可约正常返的 MC $\{X_n, n \geq 0\}$ 必存在平稳分布 $\{\pi_i\}$, 当 X_0 服从平稳分布 $\{\pi_i\}$ 时, 其逆向链也是 MC.

证: 对任意 $i, i_2, \ldots, i_k, j, m, k$,

$$\begin{aligned}
&\mathrm{P}\left(X_m = j | X_{m+1} = i, X_{m+2} = i_2, \ldots, X_{m+k} = i_k\right) \\
&= \frac{\mathrm{P}\left(X_{m+2} = i_2, \ldots, X_{m+k} = i_k | X_{m+1} = i, X_m = j\right)}{\mathrm{P}\left(X_{m+2} = i_2, \ldots, X_{m+k} = i_k | X_{m+1} = i\right)} \\
&\quad \times \frac{\mathrm{P}\left(X_{m+1} = i, X_m = j\right)}{\mathrm{P}\left(X_{m+1} = i\right)} \\
&= \frac{\mathrm{P}\left(X_{m+1} = i | X_m = j\right)\mathrm{P}\left(X_m = j\right)}{\mathrm{P}\left(X_{m+1} = i\right)} \\
&= \frac{\pi_j P_{ji}}{\pi_i}.
\end{aligned}$$

因此, $\{X_n\}$ 转移概率为

$$P_{ij}^* = \frac{\pi_j P_{ji}}{\pi_i}.$$

- 一个平稳 MC 称为时间可逆的，若 $P^*_{ij} = P_{ij}$, $\forall\ i,j$, 即

$$\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}, \quad \forall\, i,j. \tag{$*$.11}$$

注:

(i) ($*$.11) 说明, 对任意 n,

$$\mathrm{P}\left(X_n = i, X_{n+1} = j\right) = \mathrm{P}\left(X_n = j, X_{n+1} = i\right), \quad \forall\, i,j,$$

即 $(X_n, X_{n+1}) \overset{\mathrm{d}}{=} (X_{n+1}, X_n)$.

(ii) 判定时间可逆的充分条件: 若存在 pmf $\{x_j\}$ 使得

$$x_i P_{ij} = x_j P_{ji}, \quad \forall\ i,j,$$

则 $\{X_n\}$ 为时间可逆, 且平稳分布为 $\{x_j\}$.

注:

(iii) $(*.11)$ 说明

$$\underbrace{\text{从 } i \text{ 到 } j \text{ 的转移速率}}_{\pi_i P_{ij}} = \underbrace{\text{从 } j \text{ 到 } i \text{ 的转移速率}}_{\pi_j P_{ji}}.$$

可以基于频率来判断.

【例 4.7 (A)】 一个遍历简单随机游动 $\{X_n, n \geq 0\}$ 是时间可逆的.

(iv) 时间可逆 MC 直观上应满足: $\forall\ k \geq 1, m \geq 0$,

$$(X_m, X_{m+1}, \ldots, X_{m+k}) \stackrel{\mathrm{d}}{=} (X_{m+k}, \ldots, X_{m+1}, X_m). \qquad (*.12)$$

特别, 当 $k = 2$ 时,

$$\begin{aligned}\mathrm{P}\left(X_m = i, X_{m+1} = j, X_{m+2} = k\right) &= \underline{\pi_i P_{ij}}\ P_{jk} = P_{ji}\ \underline{\pi_j P_{jk}} \\ &= \pi_k P_{kj} P_{ji} = \mathrm{P}\left(X_{m+2} = i, X_{m+1} = j, X_m = k\right).\end{aligned}$$

- **观察** 一个平稳遍历的 MC $\{X_n, n \geq 1\}$, 平稳分布 $\pi_i > 0$, 于是

$$\underline{\pi_i P_{ij}} P_{jk} P_{ki} = P_{ji} \cdot \underline{\pi_j P_{jk}} P_{ki} = P_{ji} P_{kj} \cdot \underline{\pi_k P_{ki}} = \pi_i P_{ik} P_{kj} P_{ji},$$

$\Longrightarrow$

$$P_{ij} P_{jk} P_{ki} = P_{ik} P_{kj} P_{ji}.$$

- **定理 4.7.2** 不可约正常返的平稳 MC 是时间可逆的$\Longleftrightarrow$ 对 $\forall i, i_1, \ldots, i_k$, $k \geq 1$, 有

$$P_{i,i_1} P_{i_1,i_2} \cdots P_{i_{k-1},i_k} P_{i_k,i} = P_{i,i_k} P_{i_k,i_{k-1}} \cdots P_{i_2,i_1} P_{i_1,i}. \qquad (*.13)$$

注 不可约正常返的 MC 存在唯一的平稳分布 $\{\pi_i\}$, 满足 $\pi_i > 0$, $\forall\ i$.

证明： $(\Longleftarrow)$ 由 $(*.13)$ 得对 $\forall i, j, i_1, \ldots, i_k$, $k \geq 0$,

$$P_{i,i_1} P_{i_1,i_2} \cdots P_{i_{k-1},i_k} P_{i_k,j} P_{ji} = P_{ij} P_{j,i_k} P_{i_k,i_{k-1}} \cdots P_{i_2,i_1} P_{i_1,i}.$$

在上式两侧对 $i_1, i_2, \ldots, i_k$ 求和，得

$$P_{ij}^{k+1} P_{ji} = P_{ij} P_{ji}^{k+1}.$$

于是,

$$\left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} P_{ij}^{k} \right) \cdot P_{ji} = \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} P_{ji}^{k} \right) \cdot P_{ij}.$$

令 $n \to \infty$ 得

$$\pi_j P_{ji} = \pi_i P_{ij}, \quad \forall\ i, j. \quad \blacksquare$$

逆向链的概念在过程不是时间可逆的情形也是有用的.

- 定理 4.7.3 一个不可约的 MC 的转移概率矩阵为 $\mathbb{P} = (P_{ij})$. 若存在一个 pmf $\{\pi_i\}$ 和一个转移概率矩阵 $\mathbb{P}^* = (P^*_{ij})$ 使得

$$\pi_i P_{ij} = \pi_j P^*_{ji}, \quad \forall\ i, j,$$

则

(i) $\{\pi_i\}$ 为原 MC 的一个平稳分布;

(ii) P^*_{ij} 为逆向链的转移概率;

(iii) $\{\pi_i\}$ 也为逆向链的一个平稳分布.

证: 利用

$$\sum_i \pi_i P_{ij} = \sum_i \pi_j P^*_{ji} = \pi_j.$$

- 【例 4.7(E)】 考虑一批同型元件. 若一个元件在使用过程中失效, 则在该元件的下一个使用期开始用新的元件来替换. 假设元件使用期数 T 寿命独立同分布, 每个使用期是一个时间单位, 元件在第 i 个使用期失效的概率为 p_i, $i \geq 1$, 这里 $\{p_i\}$ 非周期, 且 $\mathrm{E}\,T < \infty$. 以 X_n 记时刻 n 正在使用的元件的使用期数（包含时刻 n 后的一个使用期）, 则 $\{X_n\}$ 为一个 MC, 转移概率

$$P_{i,1} = \lambda_i = 1 - P_{i,i+1}, \quad i \geq 1,$$

其中

$$\lambda_i = \frac{p_i}{\sum_{j=i}^{\infty} p_j} = \frac{p_i}{\mathrm{P}\,(T \geq i)}.$$

求平稳分布 $\{\pi_i\}$: 利用 $P^*_{1i} = p_i$, $P^*_{i,i-1} = 1$, $i > 1$,

$$\pi_i P_{i1} = \pi_1 P^*_{1i} \Longrightarrow \pi_i = \pi_1 \mathrm{P}\,(T \geq i) \Longrightarrow \pi_1 = 1/\mathrm{E}\,T$$

$$\pi_i = \frac{\mathrm{P}\,(T \geq i)}{\mathrm{E}\,T}, \quad i \geq 1. \quad \text{[离散平衡分布]}$$

时间可逆性的应用

▶ **命题 4.7.4** 设 $\{X_n\}$ 是一个不可约的 MC, 其平稳分布为 $\{\pi_i\}$, 设 ϕ 为一个定义于状态空间的有界函数, 则

$$\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\phi(X_k)=\sum_{j=0}^{\infty}\phi(j)\pi_j.$$

证: 记 $a_j(n)$ 为 MC 在前 n 步转移中访问 "j" 的次数, 则

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\phi(X_k)=\sum_{j=0}^{\infty}\underbrace{\frac{a_j(n)}{n}}_{\longrightarrow\pi_j}\phi(j).$$

注意到 pmf $\{a_j(n)/n, i\geq 0\}\xrightarrow{\mathrm{d}}\{\pi_j, j\geq 0\}$, 令 $n\to\infty$ 得证. ▮

※ "ϕ 有界" 可改为 "非负" 或条件 "$\sum\pi_i|\phi(i)|<\infty$".

MCMC (Markov Chain Monte Carlo) 方法

- 问题 1 设 $\mathbf{X}$ 是一个离散随机向量，其取值集合 $\{\mathbf{x}_j, j \geq 1\}$，$h$ 为一个给定函数，计算

$$\theta = \mathrm{E}\,[h(\mathbf{X})].$$

- Monte Carlo 方法 产生总体 $\mathbf{X}$ 的一组独立样本 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \ldots, \mathbf{X}_n$，用 $\sum_{i=1}^n h(\mathbf{X}_i)/n$ 估计 θ，这是因为 (强大数律)

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} h(\mathbf{X}_i) = \theta.$$

- 问题 2 如何产生总体 $\mathbf{X}$ 的一组（独立或具有某种特定的相依结构）样本？

MCMC方法：理论基础为命题 4.7.4、和定理 4.4.3 及其注记

▶ 定理 4.7.4 设 $\{\pi_i, i \in S\}$ 是一个 pmf, 则存在一个可逆不可约的 MC $\{X_n, n \geq 0\}$, 其状态空间为 S, 且 $\{\pi_i, i \in S\}$ 为 MC 的平稳分布.

证：不妨设 $S = \{0, 1, \ldots\}$, 任取一个不可约 MC $\{Y_n\}$, 使其转移概率矩阵为 $\mathbf{Q} = (Q_{ij})$, 满足

$$Q_{ij} = 0 \Longleftrightarrow Q_{ji} = 0, \quad i \neq j.$$

对任意 $i \neq j$, 当 $Q_{ij} = 0$ 时, 约定 $\alpha_{ij} = 1$; 当 $Q_{ij} > 0$ 时, 令

$$\alpha_{ij} = \min\left\{\frac{\pi_j Q_{ji}}{\pi_i Q_{ij}}, 1\right\},$$

且记

$$P_{ij} = Q_{ij}\alpha_{ij}, \quad P_{ii} = Q_{ii} + \sum_{j \neq i} Q_{ij}(1 - \alpha_{ij}),$$

则 $\mathbf{P}$ 为一个转移概率矩阵，满足 $P_{ij} = 0 \Longleftrightarrow P_{ji} = 0 \ (i \neq j)$.

(续) 设转移概率矩阵 **P** 对应的 MC 为 $\{X_n\}$, 则 $\{X_n\}$ 不可约. 由 $\pi_i P_{ij} = \pi_i Q_{ij}\alpha_{ij}$ 得

- 若 $\alpha_{ij} < 1$, 则 $\alpha_{ji} = 1$, 且

$$\pi_i P_{ij} = \pi_i \underline{Q_{ij}\alpha_{ij}} = \pi_j Q_{ji} = \pi_j \underline{Q_{ji}\alpha_{ji}} = \pi_j P_{ji}.$$

- 若 $\alpha_{ij} = 1$, 则 $\pi_j Q_{ji} \geq \pi_i Q_{ij}$ 及 $\alpha_{ji} \leq 1$. 于是,

$$\pi_i P_{ij} = \pi_i Q_{ij} = \pi_j \underline{Q_{ji}\alpha_{ji}} = \pi_j P_{ji}.$$

因此, $\{\pi_i\}$ 为 $\{X_n\}$ 的平稳分布. ∎

※ 上述构造转移概率矩阵 **P**, 进而得到可逆 MC 的方法称为 Hastings-Metropolis 算法, 其中 **Q** 称为预选矩阵.

MCMC 方法

将特定的分布设计成某个 MC 的平稳分布，通过模拟 MC 的轨道，近似生成特定分布的随机数或估计所需要的各种统计量.

- 两种代表性的采用方法

  Hastings-Metropolis 采样

  Gibbs 采样

※ Gibbs 采样本质上仍是一种特殊的 Hastings-Metropolos 算法, 是 MCMC 模拟中使用最为广泛的一致 MC 轨道采样方法.

- Hastings-Metropolis 采样 基于 Hastings-Metropolis 算法生成一个可逆 MC 样本轨道的抽样方法.

算法

S1 给 X_0 任意赋值.

S2 设当前时刻状态 $X_k = i$.

S3 产生一个 pmf $\{Q_{ij}, j \geq 0\}$ 的随机数，记为 j.

S4 若 $\pi_j Q_{ji}/(\pi_i Q_{ij}) \geq 1$, 则将状态更新为 $X_{k+1} = j$, 并回到 (S2); 否则，进入 (S5).

S5 独立抽取一个 $U(0,1)$ 的随机数 U. 若 $U \leq \pi_j Q_{ji}/(\pi_i Q_{ij})$, 则将状态更新为 $X_{k+1} = j$, 并回到 (S2); 否则状态不更新，即依然令 $X_{k+1} = i$, 并回到 (S2).

▶ 【例 4.7 (F)】 记 $\mathcal{P}_n$ 为 $(1, 2, \ldots, n)$ 的所有置换集合，定义 $\mathcal{P}_n$ 上的 pmf $\{\pi_\nu, \nu \in \mathcal{P}_n\}$:

$$\pi_\nu = cT(\nu),$$

其中 $T(\nu)$ 表示 ν 中数字 n 所处的位置. 构造 MC $\{X_k\}$ 使其平稳分布为 $\{\pi_v\}$.

算法设计： 为使用 Metropolis 采样，需设计一个预选矩阵 $\mathbf{Q} = (Q_{v,u})$, 对应的 MC 为 $\{Y_k\}$. 对任意 $v \in \mathcal{P}_n$, 记

$$N(v) = \{u \in \mathcal{P}_n : u \text{ 可由 } v \text{ 最多经过一次相邻对换得到}\}.$$

易知 $|N(v)| = n$.

※ 很多场合 π_ν 中的正则常数 $c > 0$ 难以计算，但在下面的算法设计中 c 不起作用.

(续) 对任意 u, v, 令

$$Q_{v,u} = \begin{cases} 1/|N(v)|, & u \in N(v), \\ 0, & u \notin N(v), \end{cases}$$

显然, $Q_{v,u} = 0 \Longleftrightarrow Q_{u,v} = 0$. 因任意两个置换可通过多次相邻对换相互转换, 所以 $\{Y_n\}$ 为不可约. 又 $Q_{v,v} > 0$, 所以 MC 为非周期的. 再定义,

$$\alpha_{v,u} = \min\left\{\frac{\pi_u Q_{u,v}}{\pi_v Q_{v,u}}, 1\right\} = \min\left\{\frac{T(u)}{T(v)}, 1\right\}.$$

因此, 由 Hastings-Metropolis 算法得到的 MC $\{X_k\}$ 为不可约、非周期可逆的, 平稳分布为 $\{\pi_v\}$.

(续)

采样算法

S1 给 X_0 任意赋值 $v_0 \in \mathcal{P}_n$.

S2 设当前时刻状态 $X_k = v$, $v \in \mathcal{P}_n$.

S3 产生一个 $\{0, 1, \ldots, n-1\}$ 上均匀分布的随机数，设为 j. 令 u 表示对换 v 中第 j 和第 $j+1$ 位置上的数所得到的置换; 当 $j = 0$ 时，令 $u = v$.

S4 若 $T(u)/T(v) \geq 1$, 则将状态更新为 $X_{k+1} = u$, 并回到 (S2); 否则，进入 (S5).

S5 独立抽取一个 $U(0,1)$ 的随机数 U. 若 $U \leq T(u)/T(v)$, 则将状态更新为 $X_{k+1} = u$, 并回到 (S2); 否则状态不更新，即依然令 $X_{k+1} = v$, 并回到 (S2).

- 【例 4.7 (G)】 已知离散型随机向量 $\mathbf{Z}=(Z_1,\ldots,Z_{50})$ 满足 $\sum_{i=1}^{50} Z_i=0$, 且每个分量可能取值为 ± 1, 即 $\mathbf{Z}$ 取值于

$$\Delta_0=\left\{\boldsymbol{\delta}=(\delta_1,\ldots,\delta_{50}):\ \delta_i=\pm 1, i=1,\ldots,50,\ \sum_{i=1}^{50}\delta_i=0\right\}.$$

$\mathbf{Z}$ 的 pmf 为

$$\pi_{\boldsymbol{\delta}}=\mathrm{P}\left(\mathbf{Z}=\boldsymbol{\delta}\right)=cT(\boldsymbol{\delta}),\quad \boldsymbol{\delta}\in\Delta_0,$$

其中 $c>0$ 为正则常数,

$$T(\boldsymbol{\delta})=\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{49}\delta_i\delta_{i+1}\right\}.$$

试用 Metropolis 采样，给出 $\mathbf{Z}$ 分布 $\{\pi_{\boldsymbol{\delta}}\}$ 的一个近似样本.

(续)

采样算法

S1 给 $\mathbf{X}_0$ 任意赋值 $\mathbf{v}_0 \in \Delta_0$.

S2 设当前时刻状态 $\mathbf{X}_k = \mathbf{v}$, $\mathbf{v} \in \Delta_0$.

S3 产生一个 $\{0, 1, \ldots, 49\}$ 上均匀分布的随机数，设为 j. 令 $\mathbf{u}$ 表示对换 $\mathbf{v}$ 中第 j 和第 $j+1$ 位置上的数所得到的置换; 当 $j = 0$ 时，令 $\mathbf{u} = \mathbf{v}$.

S4 若 $T(\mathbf{u})/T(\mathbf{v}) \geq 1$, 则将状态更新为 $\mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{u}$, 并回到 (S2); 否则，进入 (S5).

S5 独立抽取一个 $U(0, 1)$ 的随机数 U. 若 $U \leq T(\mathbf{u})/T(\mathbf{v})$, 则将状态更新为 $\mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{u}$, 并回到 (S2); 否则状态不更新，即依然令 $\mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{v}$, 并回到 (S2).

- Gibbs 采样

设 $\mathbf{Z} = (Z_1, \ldots, Z_n)$ 是一个离散随机向量，其所有可能取值集合为 S. 假设

- $\mathbf{Z}$ 的分布满足：对任意 $\mathbf{z} \in S$,

$$\pi_{\mathbf{z}} = \mathrm{P}\left(\mathbf{Z} = \mathbf{z}\right) = cg(\mathbf{z}) > 0,$$

  其中 $c > 0$ 为正则化常数.

- 对 $\forall 1 \leq i \leq n$ 及任意 z_j, $1 \leq j \leq n$, $j \neq i$, 条件分布

$$\mathrm{P}\left(Z_i = \cdot | Z_j = z_j, \forall j \neq i\right)$$

  存在且已知.

(续)　在上述假设下, Gibbs 采样模拟生成向量值 MC $\{\mathbf{Y}_k\}$:

S1　给 $\mathbf{Y}_0$ 任意赋值 $\mathbf{y}_0 \in S$.

S2　设当前时刻状态 $\mathbf{Y}_k = \mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_n) \in S$.

S3　在 $\{1, 2, \ldots, n\}$ 中随机取数，不妨设取出 i. 固定所有 y_j $(j \neq i)$ 的值, 按条件分布 $\mathrm{P}\left(Z_i = \cdot \,|Z_j = y_j, \forall j \neq i\right)$ 生成 Z_i 的随机数，比如 z.

S4　将 $\mathbf{Y}_{k+1}$ 取值更新为 $\mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_{i-1}, z, y_{k+1}, \ldots, y_n)$, 并回到 (S2).

※　$\{\mathbf{Y}_k\}$ 为非周期不可约 MC, 并以 $\mathbf{Z}$ 的分布作为平稳分布. 因此，当模拟运行足够多步后, $\mathbf{Y}_k$ 的可以看作是 $\mathbf{Z}$ 分布的一个样本点.

(续) 证：记 MC $\{\mathbf{Y}_k\}$ 的一步转移概率为 $\mathbf{Q}=(Q_{\mathbf{x},\mathbf{y}})$:

- 当 $\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{y}$ 至少有两个分量不同时，$Q_{\mathbf{x},\mathbf{y}}=0$.
- 当 $\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{y}$ 仅有一个分量不同时，假设不同分量下标为 i,

$$Q_{\mathbf{x},\mathbf{y}}=\frac{1}{n}\mathrm{P}\left(Z_i=y_i|Z_j=x_j,\forall j\neq i\right)=\frac{c\,g(\mathbf{y})}{n\,\mathrm{P}\left(Z_j=x_j,\forall j\neq i\right)}.$$

- 当 $\mathbf{x}=\mathbf{y}$ 时，

$$\begin{aligned}Q_{\mathbf{x},\mathbf{x}} &= 1-\sum_{\mathbf{y}\neq\mathbf{x}}Q_{\mathbf{x},\mathbf{y}}=1-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left[1-\mathrm{P}\left(Z_i=x_i|Z_j=x_j,\forall j\neq i\right)\right]\\ &= \frac{1}{n}cg(\mathbf{x})\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\mathrm{P}\left(Z_j=x_j,\forall j\neq i\right)}>0.\end{aligned}$$

  这说明 $\mathbf{Q}$ 是非周期的.

- $\{\mathbf{Y}_k\}$ 是不可约的，$Q_{\mathbf{x},\mathbf{y}}=0\Leftrightarrow Q_{\mathbf{y},\mathbf{x}}=0$ (因为 $g(\mathbf{x})>0,\ \forall\mathbf{x}\in S$, 所以 $Q_{\mathbf{x},\mathbf{y}}=0$ 蕴涵 $\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{y}$ 至少两个分量不同).

(续) Hastings-Metropolis 算法中的函数: 当 $Q_{\mathbf{x},\mathbf{y}} > 0$ 时,

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{x},\mathbf{y}} &= \min\left\{\frac{\pi_{\mathbf{y}} Q_{\mathbf{y},\mathbf{x}}}{\pi_{\mathbf{x}} Q_{\mathbf{x},\mathbf{y}}}, 1\right\} \\ &= \min\left\{\frac{cg(\mathbf{y})\cdot cg(\mathbf{x})}{cg(\mathbf{x})\cdot cg(\mathbf{y})}, 1\right\} = 1, \quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y}, \\ P_{\mathbf{x},\mathbf{y}} &= Q_{\mathbf{x},\mathbf{y}}\alpha_{\mathbf{x},\mathbf{y}} = Q_{\mathbf{x},\mathbf{y}}, \quad \mathbf{x}\neq\mathbf{y}, \\ P_{\mathbf{x},\mathbf{x}} &= Q_{\mathbf{x},\mathbf{x}} + \sum_{\mathbf{y}\neq\mathbf{x}} Q_{\mathbf{x},\mathbf{y}}(1-\alpha_{\mathbf{x},\mathbf{y}}) = Q_{\mathbf{x},\mathbf{x}}. \end{aligned}$$

$\Longrightarrow$

$$\mathbf{P} = \mathbf{Q},$$

即 $\{\mathbf{Y}_k\}$ 即为 $\{\mathbf{X}_k\}$, 得证. ∎

- 【例 4.7 (H)】 已知离散型随机向量 $\mathbf{Z} = (Z_1, \ldots, Z_{50})$ 的每个分量可能取值为 ± 1, 即 $\mathbf{Z}$ 取值于

$$\Delta = \{\boldsymbol{\delta} = (\delta_1, \ldots, \delta_{50}) :\ \delta_i = \pm 1, i = 1, \ldots, 50\}.$$

$\mathbf{Z}$ 的 pmf 为

$$\pi_{\boldsymbol{\delta}} = \mathrm{P}\left(\mathbf{Z} = \boldsymbol{\delta}\right) = cT(\boldsymbol{\delta}), \quad \boldsymbol{\delta} \in \Delta,$$

其中 $c > 0$ 为正则常数,

$$T(\boldsymbol{\delta}) = \exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{49}\delta_i\delta_{i+1}\right\}.$$

试用 Gibbs 采样，给出 $\mathbf{Z}$ 分布 $\{\pi_{\boldsymbol{\delta}}\}$ 的一个近似样本.

(续)

采样算法

S1 给 $\mathbf{X}_0$ 任意赋值 $\mathbf{v}_0 \in \Delta$.

S2 设当前时刻状态 $\mathbf{X}_k = \mathbf{v} = (v_1, \dots, v_{50})$, $\mathbf{v} \in \Delta$.

S3 在 $\{1, 2, \dots, 50\}$ 中随机取数，不妨设取出 i. 固定所有 v_j $(j \neq i)$ 的值, 按条件分布 $\mathrm{P}\left(Z_i = \pm 1 | Z_j = v_j, \forall j \neq i\right)$ 生成 Z_i 的随机数，比如 z.

S4 将 $\mathbf{X}_{k+1}$ 取值更新为 $\mathbf{u} = (v_1, \dots, v_{i-1}, z, v_{k+1}, \dots, v_n)$, 并回到 (S2).

半马氏过程 (Semi-Markov Process, 记为 SMP)

▶ $\{Z(t), t \geq 0\}$ 称为 SMP, 状态空间 $S = \{0, 1, 2, \ldots\}$, 如果给定当前过程处在 “i”,

- 下一次状态转移进入 “j” 的概率为 P_{ij};
- 在已知下一步转移进入 “j” 的条件下，过程滞留 “i” 的时间分布为 F_{ij}.

※

- SMP 不是马氏过程;
- 转移概率矩阵 (P_{ij}) 对应的 MC $\{X_n\}$ 称为 $\{Z(t)\}$ 的嵌入 MC.
- 若 $\{X_n\}$ 是不可约的，则称 $\{Z(t)\}$ 是不可约的.
- 通常的 MC 是特殊的 SMP, 其中 F_{ij} 对应常数 1 的分布函数.

- 记号：
  - τ_i: SMP 在下一次状态转移之前于状态 i 滞留时间
  - $\mu_i = \mathrm{E}\,\tau_i$
  - T_{ii}: SMP 相邻两次访问状态 i 的时间间隔
  - $\mu_{ii} = \mathrm{E}\,T_{ii}$
  - $\tau_i \sim H_i$

$$H_i(x) = \sum_j P_{ij} F_{ij}(x), \quad \forall\ x.$$

※ 问题：

$$P_i = \lim_{t\to\infty} \mathrm{P}\left(Z(t) = i | Z(0) = j\right) = ?$$

- 定理 4.8.1 设 SMP 为不可约，且 T_{ii} 非格子点，$\mu_{ii} < \infty$，则

$$P_i = \lim_{t\to\infty} \mathrm{P}\left(Z(t) = i | Z(0) = j\right) = \frac{\mu_i}{\mu_{ii}}, \quad \forall\ i, j.$$

证明：构造一个延迟更新过程：

$$\text{更新点} \longleftrightarrow \text{过程进入“}i\text{”的时刻},$$

于是，P_i 的取值与状态 j 无关，且

$$P_i = \frac{\mathrm{E}\left[\text{一个循环中处于“}i\text{”时长}\right]}{\text{一个循环时长}} = \frac{\mathrm{E}\,\tau_i}{\mathrm{E}\,T_{ii}} = \frac{\mu_i}{\mu_{ii}}.$$

※ 引进更新酬劳过程，取消“非格子点”的限制，得

$$P_i = \lim_{t\to\infty} \frac{(0, t]\text{ 时间段处于“}i\text{”时长}}{t} = \frac{\mathrm{E}\,\tau_i}{\mathrm{E}\,T_{ii}} = \frac{\mu_i}{\mu_{ii}}.$$

- 直观

$$P_i \propto \pi_i \mu_i,$$

其中 $\{\pi_i\}$ 为 $\{X_n\}$ 的平稳分布.

- 定理 4.8.3 设 SMP 为不可约, $\{X_n\}$ 正常返, $\mu_{ii} < \infty$, 则

$$P_i = \frac{\pi_i \mu_i}{\sum_j \pi_j \mu_j}.$$

思路: 构造一个延迟更新过程:

$$\text{更新点} \longleftrightarrow \text{过程进入 “}i\text{” 的时刻},$$

$$P_i = \lim_{t\to\infty} \frac{(0, t]\ \text{时间段处于 “}i\text{” 时长}}{t}$$

$$P_i = \lim_{m\to\infty} \underbrace{\frac{\text{前 } m \text{ 次状态转移中处于 “}i\text{” 时长}}{\text{SMP 第 } m+1 \text{ 次状态转移时刻}}}_{P_{i,m}}$$

定义

$$N_i(m) = \text{SMP 前 } m \text{ 次状态转移进入 “}i\text{” 的次数},$$

$$Y_i(j) = \text{SMP 第 } j \text{ 次进入 “}i\text{” 后在 “}i\text{” 滞留的时间}, \quad j \geq 1,$$

则，当 $m\to\infty$ 时，$N_k(m)\to\infty$，且

$$\begin{aligned} P_{i,m} &= \sum_{j=1}^{N_i(m)} Y_i(j) \Big/ \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{j=1}^{N_k(m)} Y_k(j) \\ &= \underbrace{\frac{N_i(m)}{m}}_{\to\pi_i} \cdot \underbrace{\frac{\sum_{j=1}^{N_i(m)} Y_i(j)}{N_i(m)}}_{\to\mu_i} \Big/ \sum_{k=0}^{\infty} \underbrace{\frac{N_k(m)}{m}}_{\to\pi_k} \cdot \underbrace{\frac{\sum_{j=1}^{N_k(m)} Y_k(j)}{N_k(m)}}_{\to\mu_k} \end{aligned}$$

- 【例 4.8(A)】 一部机器的运转可能有三个状态:

  良好（1）、尚好（2）、损坏（3）

以 $Z(t)$ 表示时刻 t 机器所处的状态. 该过程嵌入 MC 的转移概率矩阵为

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} 0 & 3/4 & 1/4 \\ 0 & 0 & 1 \\ 2/3 & 1/3 & 0 \end{pmatrix}$$

由 $(\pi_1, \pi_2, \pi_3) = (\pi_1, \pi_2, \pi_3)\,\mathbb{P}$, 求出平稳分布

$$\pi_1 = \frac{4}{15}, \quad \pi_2 = \frac{1}{3}, \quad \pi_3 = \frac{2}{5}.$$

给定 μ_1, μ_2, μ_3, 可以求出 P_1, P_2, P_3.

- 记号

$$Y(t) = \text{从时刻 } t \text{ 到下一次状态转移的时间间隔}$$

$$S(t) = t \text{ 之后首次转移进入的状态}$$

- 定理 4.8.4 设 SMP 不可约，非格子点 (即 T_{ii} 非格子点，$\forall\, i$)，且 $\mu_{ii} < \infty$，则

$$\lim_{t\to\infty} \mathrm{P}\left(Z(t) = i, Y(t) > x, S(t) = j \,|\, Z(0) = k\right) = \frac{P_{ij}}{\mu_{ii}} \int_x^\infty \overline{F}_{ij}(u)du.$$

证：构造一个延迟交替更新过程：

$$\text{更新点} \longleftrightarrow \text{过程进入“}i\text{”的时刻},$$

$$\text{时刻 } t \text{ 处于“on”} \longleftrightarrow Z(t) = i, Y(t) > x, S(t) = j,$$

$$T_{ii}^{\text{on}} = \left[(\tau_i - x)_+ \cdot 1_{\{X_1=j\}} \,|\, X_0 = i\right]$$

$$[\tau_i | X_0 = i, X_1 = j] \sim F_{ij}$$

▶ 推论　设 SMP 不可约, 非格子点 (即 T_{ii} 非格子点, $\forall\, i$), 且 $\mu_{ii} < \infty$, 则

$$
\begin{aligned}
&\lim_{t\to\infty} \mathrm{P}\left(Z(t)=i, Y(t)>x \,|\, Z(0)=k\right)\\
&= \frac{1}{\mu_{ii}} \int_x^\infty \overline{H}_i(u)du\\
&= P_i \cdot \overline{H}_{i,e}(x),
\end{aligned}
$$

其中

$$
H_{i,e}(x) = \frac{1}{\mu_i} \int_0^x \overline{H}_i(u)du, \quad x \geq 0 \quad [H_i \text{ 的平衡分布}] \qquad (*.14)
$$

$(*.14)$ 的直观解释

作业

第 4 章第一次作业

1，3，5，6，8，9，11

第 4 章第二次作业

31，32，33，45，48，49，50