

第二章 有限状态马尔可夫链

大家一定对于“洗牌”过程非常熟悉. 我们在玩扑克牌之前, 总是会把牌洗匀, 以确保每个人摸到的牌是随机的. 常用的洗牌方式有好几种, 比如

- 鸽尾洗牌法 (*dovetail shuffle*) 把牌堆大致分成两半, 然后交替地从两半中抽牌放回去.
- 顶牌随机插入法 (*top-to-random shuffle*) 每次把顶牌取出, 随机插入到牌堆中某个位置.
- 随机置顶法 (*random-to-top shuffle*) 每次随机选一张牌, 放到牌堆顶端.

生活中的经验告诉我们, 当洗的次数足够多之后, 牌堆的顺序会变得足够随机, 以至于每一种排列出现的概率都差不多, 即所谓的“洗匀了”. 但我们不禁要问, 这件事情为什么是对的呢? 更进一步的, 我们要洗多少次牌才能够让牌序足够均匀? 这些洗牌的策略有没有效率上的优劣之分? 为了精确回答的这个问题, 我们需要对洗牌的过程进行数学建模, 而这里用到的模型正是马尔可夫链 (*Markov chain*).

2.1 离散马尔可夫链的基本概念

我们可以仔细地观察洗牌的过程. 假设总共有 n 张牌, 我们用 $1, \dots, n$ 来给它们编号. 我们可以用 X_t 来表示进行了 t 次洗牌后的牌堆状态. 也就是, X_t 是 n 张牌的一个排列. 而洗牌的每一次操作, 就是从 X_t 到 X_{t+1} 的一个随机变换. 不同的洗牌方式实际上对应了这个随机变换的不同. 但这些随机变换有一个共同的性质: X_{t+1} 的分布只依赖于 X_t , 而和 $X_{t-1}, X_{t-2}, \dots, X_0$ 无关. 也就是说, 给定当前的牌堆状态, 下一次洗牌后牌堆状态的分布就已经确定了, 而不需要知道之前牌堆的状态. 我们把这种性质抽象出来, 称为马尔可夫性质 (*Markov property*). 满足马尔可夫性质的随机变量序列, 就被称为马尔可夫链.

定义 2.1 离散马尔可夫链.

假设有一列离散随机变量 $X_0, X_1, \dots, X_t, \dots$, 其中每一个 X_t 的取值都来自于可数集合 S . 如果 $\forall t \geq 1$, 随机变量 X_t 的分布只依赖于 X_{t-1} , 即 $\forall a_0, a_1, \dots, a_t \in$

鸽尾洗牌法

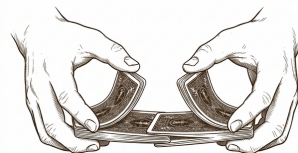


图 2.1: 鸽尾洗牌法又称对切法 (*rifle shuffle*), 是一种在数学上得到了广泛研究的洗牌方式.

在我们这门课程中, 我们总是假设这些随机变量定义在一个合适的概率空间 (Ω, \mathcal{F}, P) 上. 我们说定义在 Ω 上的随机变量 X 是离散的, 当且仅当 $\{X(\omega) : \omega \in \Omega\}$ 是一个可数集合.

S ,

$$P[X_t = a_t | X_{t-1} = a_{t-1}, \dots, X_1 = a_1, X_0 = a_0] = P[X_t = a_t | X_{t-1} = a_{t-1}].$$

那么, 我们称 $\{X_t\}$ 为离散马尔可夫链.

从这个定义可以看出, 我们前面提到的不同的洗牌方式, 实际上对应了概率转移 $P[X_t = a_t | X_{t-1} = a_{t-1}]$ 的不同选择. 我们本章主要关心 S 是有限集合的场合, 因此可以不失一般性的假设 $S = [N]$, 其中 $N \in \mathbb{N}$. 于是, 对于每一个 $t \geq 1$, 我们可以用一个 $N \times N$ 的矩阵 $P^{(t)} = (p_{ij}^{(t)})$ 来表示从时间 $t-1$ 到时间 t 的转移概率, 其中

$$p_{ij}^{(t)} = P[X_t = j | X_{t-1} = i].$$

在我们洗牌的例子里, 由于每一次洗牌的方式都是一样的, 因此 $P^{(t)}$ 实际上和 t 无关, 我们可以把它简记为 P . 满足这个性质的马尔可夫链, 称为时间齐次 (*time-homogeneous*) 马尔可夫链. 矩阵 P 常常被称为马尔可夫链的转移矩阵, 它唯一刻画了时间齐次马尔可夫链每一步的行为.

我们可以等价的用一个有 N 个顶点的加权有向图来表示 P , 其中边 (i, j) 的权即为 p_{ij} . 我们称它为转移图.

示例 2.2 有限状态随机游走.

图 2.2 为转移矩阵

$$P = (p_{ij}) = \begin{bmatrix} 1/2 & 3/8 & 1/8 \\ 1/3 & 0 & 2/3 \\ 1/4 & 3/4 & 0 \end{bmatrix}$$

对应的转移图.

我们接下来看一些马尔可夫链的例子.

示例 2.3 \mathbb{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 2.4 $\{\pm 1\}^d$ 上的随机游走.

在这个定义里, “离散” 这个修饰词是为了强调我们讨论的马尔可夫链的状态空间 S 是一个可数集合. 此外, 我们的时间参数 t 也是离散的 ($t = 0, 1, 2, \dots$). 如果更进一步 S 是一个有限大小的集合, 我们就称这个马尔可夫链为有限状态马尔可夫链.

有的时候为了更形象的表明“转移概率”, 我们会用 $P(i \rightarrow j)$ 来表示 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 $p_{ij} > 0$.

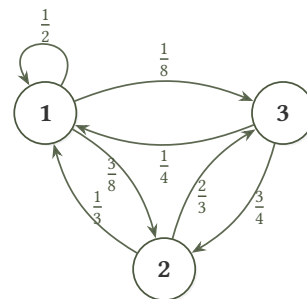
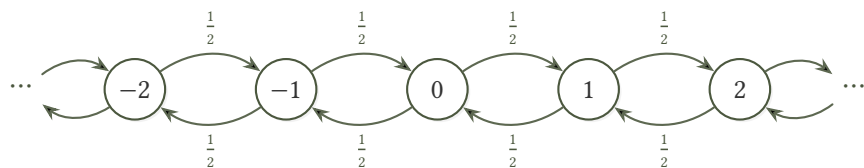


图 2.2: 转移矩阵 P 对应的转移图

图 2.3: \mathbb{Z} 上的简单随机游走的转移图

考虑 d 维超立方体 (hypercube) 上的随机游走. 状态空间为 $V = \{-1, +1\}^d$, 包含 2^d 个顶点, 每个状态表示为一个长度为 d 的向量 $x = (x_1, \dots, x_d)$, 其中 $x_i \in \{-1, +1\}$. 如果在时间 $t-1$ 时的位置为 X_{t-1} , 则时间 t 的位置 X_t 通过以下方式确定: 从集合 $\{1, \dots, d\}$ 中均匀随机地选取一个坐标索引 k , 并将 X_{t-1} 的第 k 个分量符号翻转 (即乘以 -1), 其余分量保持不变. 这等价于从当前顶点的 d 个邻居中均匀随机地选择一个作为下一步的位置. 这是一个有限状态空间上的马尔可夫链.

示例 2.5 网页浏览.

考虑一个在网上随机浏览的网页的人. 假设状态空间 V 由所有网页组成, 这是一个巨大的有限集. 该随机游走的转移规则由两部分混合而成: 设当前位于页面 i , 且页面 i 有 k_i 个出链. 在每一步, 浏览者以概率 α 从当前页面的 k_i 个出链中均匀随机地选择一个链接跳转; 以概率 $1-\alpha$ 从整个状态空间 V 中均匀随机地 (或根据特定的个性化分布) 选择一个页面跳转. 这种对浏览网页方式的建模方式被称为随机冲浪者 (random surfer) 模型. 它是搜索引擎 PageRank 算法量化网页重要性的基础.

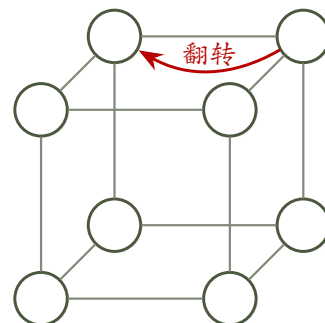
既然使用马尔可夫链可以用来描述这么多具体的问题, 那么, 我们自然也希望能够用它来分析问题的性质. 比如说, 我告诉你一副牌初始是按照顺序排列的, 那我用鸽尾洗牌法洗了三回之后, 牌堆的顺序是什么样子的呢? 显然, 这个顺序是随机的, 那么它的分布是什么? 根据我们刚才的讨论, 对于时间齐次的马尔可夫链, 转移矩阵 P 完全的描述了马尔可夫链每一步的行为. 因此, 我们可以使用线性代数的工具通过研究矩阵 P 来分析马尔可夫链的性质. 我们接下来讨论一些基本的结论.

使用线性代数

一个贯穿本书始终的记号是我们会使用 μ_t 来表示马尔可夫链里 X_t 的分布. 也就是说,

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

因此, μ 是一个定义在 $[N]$ 上的, 取值为 $[0, 1]$ 的函数, 并且满足 $\sum_{i \in [N]} \mu(i) = 1$. 我们有的时候也会把它等价的看成是 $[0, 1]^{[N]}$ 里的一个列向量, 即 $\mu = (\mu(1), \mu(2), \dots, \mu(N))^T$.

图 2.4: $d = 3$ 时的超立方体图, 其中红色箭头示意一步“翻转”操作

对概率论熟悉的读者会发现我们这里的“分布” μ 和概率论里面的“分布”有一点不一样, 后者是定义在所有事件上的函数. 我们这儿的分布实际上是离散场合的概率质量函数 (probability mass function), 这是一个被普遍接受的“记号滥用”.

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任何 μ_s ($s \geq 0$) 出发计算 μ_{s+t} 的公式

$$\mu_{s+t}^\top = \mu_s^\top P^t. \quad (2.1)$$

从式 (2.1) 也可以看出来, 矩阵 P^t 直观上可以解释成马尔可夫链走 t 步的转移矩阵. 使用矩阵乘法的结合律, 我们显然有等式

$$\forall s, t \geq 0: \quad P^{s+t} = P^s P^t. \quad (2.2)$$

这个等式在随机过程的文献里被称为查普曼-科尔莫戈罗夫 (Chapman-Kolmogorov) 方程.

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.

简称为 C-K 方程. 我们未来会看到它以多种形态出现.

马尔可夫链的平稳分布 (stationary distribution)

在洗牌的例子里, 我们关注的最基本的问题是, 经过多次洗牌后, 牌堆的顺序是否会接近于均匀随机? 这就引出了马尔可夫链的一个重要概念: 平稳分布. 对于洗牌来说, 答案是肯定的, 其原因就在于均匀分布是洗牌这个马尔可夫链所对应的唯一的平稳分布, 并且从任何一个分布出发, 执行足够多的操作之后, 均会收敛到它. 这样一个看似简单的过程, 实际上就是所谓的马尔可夫链蒙特卡罗方法 (Markov chain Monte Carlo, MCMC) 的核心思想, 我们在本书中会详细的讨论这个方法.

便让我们从平稳分布的定义开始.

MCMC 方法将贯穿本书始终, 尽情期待.

定义 2.6 平稳分布.

考虑转移矩阵为 P 的马尔可夫链. 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.

示例 2.7 平稳分布的例子.

我们逐一讨论上一节中各个例子的平稳分布.

1. 有限状态随机游走. 回忆转移矩阵

$$P = \begin{bmatrix} 1/2 & 3/8 & 1/8 \\ 1/3 & 0 & 2/3 \\ 1/4 & 3/4 & 0 \end{bmatrix}.$$

我们要求解 $\pi^T P = \pi^T$ ，结合 $\sum_i \pi(i) = 1$ 。取后面两个方程：

$$\begin{aligned}\frac{3}{8}\pi(1) + \frac{3}{4}\pi(3) &= \pi(2), \\ \frac{1}{8}\pi(1) + \frac{2}{3}\pi(2) &= \pi(3).\end{aligned}$$

解方程可得 $\pi(1) : \pi(2) : \pi(3) = 16 : 15 : 12$ ，即

$$\pi = \left(\frac{16}{43}, \frac{15}{43}, \frac{12}{43}\right)^T.$$

2. \mathbb{Z} 上的随机游走。如果 π 是平稳分布，则对每个 $i \in \mathbb{Z}$ ，

$$\pi(i) = \frac{1}{2}\pi(i-1) + \frac{1}{2}\pi(i+1),$$

即 $\pi(i+1) - \pi(i) = \pi(i) - \pi(i-1)$ 。这意味着差分 $\pi(i+1) - \pi(i)$ 是常数，也就是 π 是关于 i 的一次函数： $\pi(i) = a + bi$ 。但 π 必须非负且可求和 ($\sum_{i \in \mathbb{Z}} \pi(i) = 1$)，所以只能 $b = 0$ ，即 π 是常值函数。然而常值函数在 \mathbb{Z} 的求和是无穷大。因此， \mathbb{Z} 上的简单随机游走不存在平稳分布。

3. $\{\pm 1\}^d$ 上的随机游走。超立方体图是 d -正则图（每个顶点恰好有 d 个邻居），因此由对称性可以猜测均匀分布 $\pi(x) = \frac{1}{2^d}$ 是平稳分布。直接验证：每个状态 x 恰好有 d 个邻居，从每个邻居出发走到 x 的概率为 $\frac{1}{d}$ ，因此

$$[\pi^T P](x) = d \cdot \frac{1}{2^d} \cdot \frac{1}{d} = \frac{1}{2^d} = \pi(x).$$

4. 网页浏览（随机冲浪者模型）。在这个模型中，浏览者每一步都有 $1-\alpha$ 的概率等概率地跳转到任意页面（包括自身），因此从任何页面出发一步内都有正概率到达任何其他页面。如果平稳分布存在且唯一，那么它就是著名的 *PageRank* 向量：Google 搜索引擎正是通过计算这个向量来量化每个网页的“重要性”。由于状态空间（即所有网页的集合）非常巨大，直接求解线性方程 $\pi^T P = \pi^T$ 是不可行的。我们后面将看到，通过不断模拟该马尔可夫链来逼近 π 是一种可行的做法——这正是 MCMC 方法的核心思想。

一般来说， $\pi^T P = \pi^T$ 的 N 个方程中总有一个是冗余的（为什么？），所以我们需要利用归一化条件 $\sum_i \pi(i) = 1$ 来确定 π 。

这个现象的根源在于 \mathbb{Z} 是无穷状态空间。我们将在下面证明，有限状态马尔可夫链一定存在平稳分布。

我们刚才看到，有的马尔可夫链有平稳分布（如有限状态随机游走和超立方体上的随机游走），有的则没有（如 \mathbb{Z} 上的随机游走）。让我们回到洗牌的例子来思考更多的问题。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？假设我们想出老千，希望洗完牌牌的顺序接近我们想要的某种顺序，应该怎么办？这些问题都可以归结于马尔可夫链平稳分布的性质。我们用数学的语言把它们抽象出来，便是以下几个问题：

- (1) 每个马尔可夫链是否都有平稳分布？
- (2) 如果一个马尔可夫链有平稳分布，它是否唯一？

- (3) 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?
- (4) 如果 μ_t 总是收敛到平稳分布, 收敛的速率是多少?
- (5) 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?

在本书中, 我们将尝试回答这些问题.

2.2 马尔可夫链基本定理

马尔可夫链基本定理回答了上面的前三个问题, 即马尔可夫链平稳分布的存在性、唯一性以及收敛性. 它有很多种证明的方法, 有意思的是, 大部分证明它的方法都可以在一定程度上来回答第四个问题, 即收敛的速率.

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 $\pi^T P = \pi^T$. 注意, 这等价于“1 是 P^T 的一个特征值, 并且它有一个非负特征向量 ($P^T \pi = \pi$)”. 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^T 有同样的特征多项式, 因此, 1 也是 P^T 的特征值. 于是, 我们可以找到一个向量 \mathbf{v} , 满足 $P^T \mathbf{v} = \mathbf{v}$. 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^T 对应于 1 的一个特征向量.

对于任何 $i \in [N]$, 我们可以验证,

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

我们只需要说明, 对于每一个 i , 上面式子中的 \leq 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

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

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^T 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.

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. 当然了, 我们现在还没有严格定义分布的“收

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.

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

敛”的概念，在这一节，我们不妨把它想象成分布向量在每一个维度上的收敛，也就是说，对于定义在 $[N]$ 上的分布 μ_t ，我们说它收敛到分布 π ，如果对于每一个 $i \in [N]$ ，都有

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mu_t(i) = \pi(i).$$

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，其状态转移图如图 2.5 所示。

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 $\pi = \left(\frac{q}{p+q}, \frac{p}{p+q} \right)^T$ 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 。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

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |\mu_0^T P^t(1) - \pi(1)| \rightarrow 0$$

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。根据式 (2.1)， $\mu_t^T = \mu_{t-1}^T P$ ，因此我们有

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

整理可得 $\Delta_t = |1-p-q| \cdot \Delta_{t-1}$ 。因此可以看出，除非 $p = q = 0$ 或者 $p = q = 1$ ， $\Delta_t \rightarrow 0$ 总成立。

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。

$p = q = 0$ 的情况

首先考虑 $p = q = 0$ 的情况。此时马尔可夫链如图 2.6 所示。

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：

定义 2.8 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。

$p = q = 1$ 的情况

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图 2.7 所示。

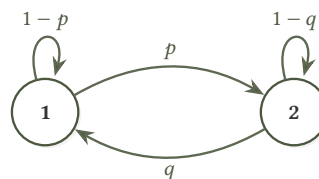


图 2.5: 两个状态的马尔可夫链的转移图



图 2.6: $p = q = 0$ 时候的转移图

给定 $[N]$ 上的两个分布 μ_1 和 μ_2 ，我们说 μ 是它们的混合 (mixture) 当且仅当存在某个 $\alpha \in [0, 1]$ 使得 $\mu = \alpha\mu_1 + (1-\alpha)\mu_2$ 。换句话说，我们可以以如下方式从 μ 中采样一个样本：以概率 α 从 μ_1 中采样，以概率 $1-\alpha$ 从 μ_2 中采样 x 。

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 $(0, 1)^T$ 。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。

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 $\mu_0 = (1, 0)^T$, 可以看到 μ_t 在 $(1, 0)^T$ 和 $(0, 1)^T$ 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.

定义 2.9 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.

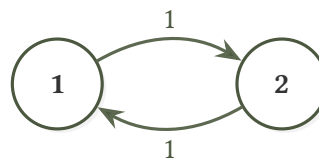


图 2.7: $p = q = 1$ 时候的转移图

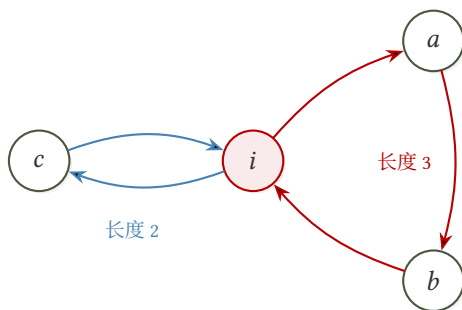


图 2.8: 状态 i 包含在一个长度为 2 的环和一个长度为 3 的环中. 由于 $\gcd(2, 3) = 1$, i 是无周期的.

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.

实际上, 对于有限状态马尔可夫链来说, 不可约性和无周期性就保证了平稳分布是唯一存在, 并且从任意分布出发都能收敛到它. 这便是我们接下来要介绍的马尔可夫链基本定理 (*fundamental theorem of Markov chains, FTMC*), 它是我们第一个关于马尔可夫链的重要定理.

定理 2.10 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

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.

我们之前提到过, 这里的收敛我们理解为逐点收敛, 即对于每一个 $i \in [N]$, $\lim_{t \rightarrow \infty} (\mu^T P^t)(i) = \pi(i)$.

平稳分布 $\pi \in \mathbb{R}^N$ ，并且对于任意分布 $\mu \in \mathbb{R}^N$ ，

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

2.3 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。

可逆 (reversible) 马尔可夫链

对于一个定义在状态空间 $[N]$ 上的马尔可夫链 P ，如果存在某个分布 π 满足

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

那么它就被称为(时间)可逆的。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：

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

“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, \dots, X_t 的分布，即 $(X_0, X_1, \dots, X_{t-1}, X_t)$ 的分布与 $(X_t, X_{t-1}, \dots, X_1, X_0)$ 的分布是相同的。换句话说，对于所有 $x_0, x_1, \dots, x_t \in [N]$ ，

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

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 2.11.

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

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

示例 2.12.

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, \dots, 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

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

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。

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。给定任意一个连通的无向图 (V, E) 作为转移图，设 Δ 为转移图中除自环外的最大度数（即 $\Delta := \max_{i \in [N]} \sum_{j \neq i \in [N]} \mathbb{1}[\{i, j\} \in E]$ ）。设当前状态为 i ，且 i 有 d 个邻居。一步转移按如下方式进行：首先，均匀随机地从 i 的 d 个邻居中选择一个 j ，作为提议状态。然后，以概率 $\min\left\{\frac{\pi(j)}{\pi(i)}, 1\right\}$ 接受该提议（移动到 j ），否则拒绝（留在 i ）。此外，为了保证所有顶点的度数一致，我们在上述过程之前附加一个懒惰化步骤：以概率 $\frac{d}{\Delta+1}$ 执行上面的提议-接受流程，以概率 $\frac{\Delta+1-d}{\Delta+1}$ 直接留在 i 。这等价于给每个状态 i 补充 $\Delta+1-d$ 条自环，使得包含自环在内每个点的度数均为 $\Delta+1$ 。以下给出该算法的伪代码。

算法 2.13 Metropolis-Hastings 一步转移.

Require: 当前状态 i ，目标分布 π ，转移图 (V, E) ，最大度数 Δ

1: 均匀随机选取 $k \in \{1, 2, \dots, \Delta+1\}$

2: **if** $k \leq d$ **then**

▷ d 为 i 的邻居数

3: | 令 $j \leftarrow i$ 的第 k 个邻居

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。

实际上，对于可逆链，边 (i, j) 的权重的正确看法是定义为 $\pi(i) \cdot P(i \rightarrow j)$ 。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。

```

4:   以概率  $\min\left\{\frac{\pi(j)}{\pi(i)}, 1\right\}$  令  $i \leftarrow j$ 
5:   return  $i$ 

```

▷ 接受提议

于是转移矩阵 P 为

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

我们可以验证, P 对于 π 是可逆的:

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

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 2.10, 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 .

示例 2.14.

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.

我们将在未来多次使用 Metropolis-Hastings 算法构造理想平稳分布的马尔可夫链.

2.4 耦合 (coupling)

我们在这一节引入称为耦合的概念, 是概率论中一个非常重要的工具, 也是我们在下一节证明马尔可夫链基本定理的核心技巧. 我们首先定义两个分布的全变差距离 (total variation distance).

定义 2.15 全变差距离.

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 $\sum_j w(j)$.

在一个可数状态空间 Ω 上, 两个分布 μ 和 ν 的全变差距离定义为 $d_{TV}(\mu, \nu) := \frac{1}{2} \sum_{x \in \Omega} |\mu(x) - \nu(x)|$.

我们可以观察下图 (概率质量函数的图像) 中两个分布在同一样本空间上的关系. 全变差距离等于两条曲线所围面积的一半.

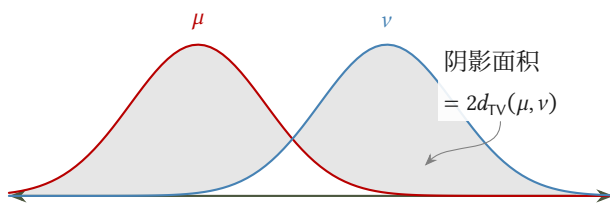


图 2.9: 两个分布的全变差距离

从图中我们可以看出如下命题成立 (见第一章练习) .

命题 2.16.

定义 $\mu(A) = \sum_{x \in A} \mu(x)$, $\nu(A) = \sum_{x \in A} \nu(x)$, 则有

$$d_{TV}(\mu, \nu) = \max_{A \subseteq \Omega} |\mu(A) - \nu(A)|.$$

换句话说, 两个分布 μ 和 ν 的全变差距离, 可以看成那些所有 μ 比 ν 大的样本点上的概率差的和.

现在我们给出耦合的正式定义.

定义 2.17 耦合.

设 μ 和 ν 是分别定义在空间 Ω_1 和 Ω_2 上的两个分布. 令 ω 为定义在空间 $\Omega_1 \times \Omega_2$ 上的分布. 如果随机变量 $(X, Y) \sim \omega$ 满足 $X \sim \mu$ 且 $Y \sim \nu$, 则称 ω 为 μ 和 ν 的一个耦合.

我们有时候也会说一个新的 (定义在另外的概率空间上的) 二元随机变量 (\tilde{X}, \tilde{Y}) 随机变量是 X 和 Y 的耦合, 它的意思是, (\tilde{X}, \tilde{Y}) 的分布是 X 的分布和 Y 的分布的耦合. 在这门课里, 在不会引起误解的情况下, 我们语言上不太区分随机变量的耦合和分布的耦合.

耦合总是存在的, 比如我们让 $\omega = \mu \otimes \nu$, 即 $(X, Y) \sim \omega$ 对应于 X 和 Y 各自独立的来自 μ 和 ν , 那显然 ω 是 μ 和 ν 的耦合. 然而, 在许多应用中, 我们希望 X 和 Y 是相关的, 同时保持它们各自的边缘概率正确.

事实上, 对于一般 (不一定离散) 的分布 μ 和 ν , 我们用这个式子定义它们的全变差距离, 即

$$d_{TV}(\mu, \nu) := \sup_A |\mu(A) - \nu(A)|.$$

其中 A 来自于所有的可测集.

严格的说, 我们有两个概率空间 $(\Omega_1, \mathcal{F}_1, \mu)$ 和 $(\Omega_2, \mathcal{F}_2, \nu)$, 那么我们说概率空间 $(\Omega_1 \times \Omega_2, \mathcal{F}_1 \otimes \mathcal{F}_2, \omega)$ 上的概率测度 ω 是 μ 和 ν 的耦合, 当且仅当如果随机变量 (X, Y) 的分布是 ω , 那么它们的边缘分布 X 和 Y 分别是 μ 和 ν .

示例 2.18 硬币的耦合.

设 $\mu = \text{Ber}(\frac{1}{2})$, $\nu = \text{Ber}(\frac{2}{3})$, $X \sim \mu$, $Y \sim \nu$. 下面两个表格分别给出了 (X, Y) 的两种联合分布 (即两种耦合), 每个格子的值是 $P[X = x, Y = y]$.

	Y = 0	Y = 1
X = 0	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$
X = 1	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$

	Y = 0	Y = 1
X = 0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$
X = 1	0	$\frac{1}{2}$

左表是独立耦合 ($\omega(x, y) = \mu(x) \cdot \nu(y)$), 此时 $P[X \neq Y] = \frac{1}{6} + \frac{1}{3} = \frac{1}{2}$. 右表则“尽量”地把概率放到了对角线上 (即 $X = Y$ 的格子), 使得 $P[X \neq Y] = \frac{1}{6}$.

在上面的例子里, 第一张图对应的是两个独立的硬币 $X \sim \text{Ber}(\frac{1}{2})$, $Y \sim \text{Ber}(\frac{2}{3})$. 而在第二张图里, 可以验证, 这是使得 $P_{(X,Y) \sim \omega}[X = Y]$ 最大的耦合 ω .

示例 2.19 随机图的比较.

Erdős-Rényi 随机图模型 $\mathcal{G}(n, p)$ 是指这样一个包含 n 个顶点的随机图的分布, 我们通过如下操作来得到一个随机图 $G \sim \mathcal{G}(n, p)$: 对于每一对点 $\{i, j\}$, 我们独立的扔一个 $\text{Ber}(p)$ 的硬币, 如果是正面, 就加入边 $\{i, j\}$, 如果是反面, 则不加入. 我们现在想证明, $P_{G \sim \mathcal{G}(n, 1/2)}[G \text{ 连通}] \leq P_{H \sim \mathcal{G}(n, 2/3)}[H \text{ 连通}]$. 这看似是一个很显然的结论, 但似乎不太好严格的证明. 我们现在用耦合的想法, 来巧妙的说明.

我们首先看一下, 如果要从 $\mathcal{G}(n, p)$ 中真的采样一个图, 应该如何操作. 一个很自然的作法就是依次检查每一个 $\{i, j\}$, 对每一个点对, 在 $[0, 1]$ 中均匀随机的选取一个实数 r , 然后看如果 $r \leq p$, 则加上边 $\{i, j\}$ 否则不加. 我们现在想象有两个人同时从 $\mathcal{G}(n, 1/2)$ 和 $\mathcal{G}(n, 2/3)$ 中采样图 G 和 H . 她们依次检查同一个 $\{i, j\}$, 然后对每一个点对, 在 $[0, 1]$ 中均匀随机的选取一个实数 r , 然后两个人使用同一个 r , 来决定自己的图里面是否有这一条边. 显然, 这样获得的 G 和 H 的分布是 $\mathcal{G}(n, 1/2)$ 和 $\mathcal{G}(n, 2/3)$ 的耦合. 我们把这个耦合称作 ω . 此外, 我们的构造保证了, 如果 $\{i, j\}$ 是 G 的边, 那么它一定也是 H 的边 (因为 $r \leq 1/2 \implies r \leq 2/3$). 所以我们有下面的结论:

$$\begin{aligned} P_{G \sim \mathcal{G}(n, 1/2)}[G \text{ 连通}] &= P_{(G,H) \sim \omega}[G \text{ 连通}] \\ &\leq P_{(G,H) \sim \omega}[H \text{ 连通}] \\ &= P_{H \sim \mathcal{G}(n, 2/3)}[H \text{ 连通}]. \end{aligned}$$

实际上, 我们这里在每条边上构造的耦合就是示例 2.18 里第二个表格里的

请验证两个表格的行和与列和分别是 μ 和 ν .

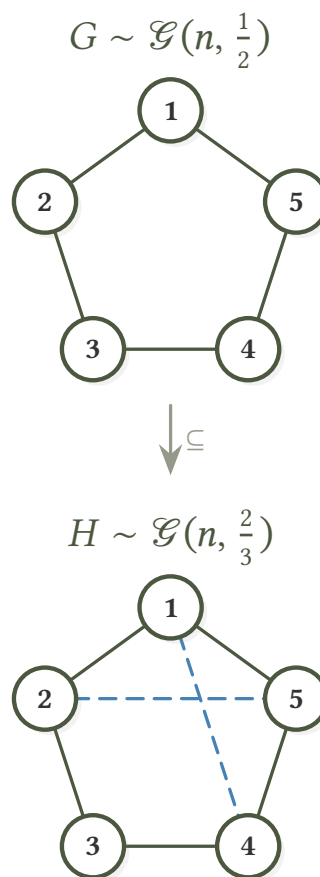


图 2.10: 通过耦合使得 $G \subseteq H$

耦合.

实际上, 我们会特别关心这种使 $X = Y$ 概率最大的耦合, 因为它与两个分布的全变差距离有密切联系. 下面这个结论, 称为耦合引理 (*coupling lemma*), 会在我们未来的学习中扮演关键的角色. 同样, 我们不妨假设我们考虑的是有限的概率空间. 这个引理对于一般的概率空间也是正确的, 但其证明留作练习.

这也可能是耦合之所以被称为耦合的原因. 在文献中, 我们往往把 $X = Y$ 这个事件称为“ X 和 Y 耦合住了 (coupled)”.

引理 2.20 耦合引理.

设 μ 和 ν 是定义在同一个 (离散) 样本空间 Ω 上的两个分布. 则对于 μ 和 ν 的任何耦合 ω , 有

$$\mathbb{P}_{(X,Y)\sim\omega}[X \neq Y] \geq d_{TV}(\mu, \nu).$$

并且, 存在一个“最优”耦合 ω^* , 使得

$$\mathbb{P}_{(X,Y)\sim\omega^*}[X \neq Y] = d_{TV}(\mu, \nu).$$

证明. 对于有限的 Ω , 设计一个耦合等价于填充一个 $\Omega \times \Omega$ 的矩阵, 使得其边缘分布正确. 显然有

$$\mathbb{P}[X = Y] = \sum_{t \in \Omega} \mathbb{P}[X = Y = t] \leq \sum_{t \in \Omega} \mu(t) \wedge \nu(t).$$

回忆我们定义过记号 $a \wedge b := \min\{a, b\}$, $a \vee b := \max\{a, b\}$.

因此,

$$\mathbb{P}[X \neq Y] \geq 1 - \sum_{t \in \Omega} \mu(t) \wedge \nu(t) = \sum_{t \in \Omega} (\mu(t) - \mu(t) \wedge \nu(t)).$$

由此,

$$\mathbb{P}[X \neq Y] = \max_{A \subseteq \Omega} \{\mu(A) - \nu(A)\} = d_{TV}(\mu, \nu).$$

为了构造“最优”的耦合 ω^* 使得上述不等式取到等号, 对于每个 $t \in \Omega$, 我们可以“贪心”的令 $\mathbb{P}_{(X,Y)\sim\omega^*}[X = Y = t] = \min\{\mu(t), \nu(t)\}$. 当然, 我们还要说明剩下的格子能够合法的填下去. 至少存在这样一种填法: 把剩下的格子里的概率定义成对于 μ 和 ν 去掉对角线概率然后进行合理归一化后各自的概率乘积. \square

请务必想明白剩下的各自概率如何构造.

耦合引理为两个分布之间的距离提供了一种上界: 对于任意两个分布 μ 和 ν 及其任意耦合 ω , $\mathbb{P}_{(X,Y)\sim\omega}[X \neq Y]$ 的上界也是 $d_{TV}(\mu, \nu)$ 的上界. 这是一种非常有用的方法来约束全变差距离.

2.5 马尔可夫链基本定理的证明

我们现在回忆一下在 2.2 节中介绍的马尔可夫链的基本定理.

定理 2.21 马尔可夫链的基本定理.

若有限马尔可夫链 $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是不可约且非周期的, 则它有唯一的平稳分布 $\pi \in \mathbb{R}^n$. 并且, 对于任意分布 $\mu \in \mathbb{R}^n$, 有

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mu^T P^t = \pi^T.$$

我们在这一节给出一个基于耦合法的证明.

不可约且非周期链的代数性质

我们首先研究不可约且非周期链的转移矩阵 P 的性质. 我们将使用以下引理.

引理 2.22.

设 c_1, c_2, \dots, c_s 是一组正整数, 满足 $\gcd(c_1, \dots, c_s) = 1$. 则对于任何足够大的整数 b , 存在 $y_1, y_2, \dots, y_s \in \mathbb{N}$ 使得

$$c_1 y_1 + c_2 y_2 + \dots + c_s y_s = b.$$

证明. 根据 Bézout 恒等式, 存在 $x_1, x_2, \dots, x_s \in \mathbb{Z}$, 使得

$$c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_s x_s = 1.$$

我们对 s 进行归纳. $s = 1$ 的情形显然成立. 假设 $s \geq 2$ 且引理对更小的 s 成立. 令 $g = \gcd(c_1, \dots, c_{s-1})$. 根据归纳假设, 我们知道

$$\frac{c_1}{g} \cdot x_1 + \frac{c_2}{g} \cdot x_2 + \dots + \frac{c_{s-1}}{g} \cdot x_{s-1} = b' \iff c_1 \cdot x_1 + c_2 \cdot x_2 + \dots + c_{s-1} x_{s-1} = g \cdot b'$$

对足够大的 b' 有非负解. 因此, 我们只需证明以下方程

$$g \cdot b' + c_s \cdot x_s = b \tag{1}$$

对于任何足够大的 b , 存在非负解 (b', x_s) , 且 $b' > 0$. 换句话说, 我们需要证明, 对于任意 $b_0 > 0$, 当 b 足够大时, 方程 (1) 有 $b' > b_0$ 的非负解.

注意到 $\gcd(g, c_s) = 1$, 我们可以找到整数 (y, x) 使得

$$g \cdot y + c_s \cdot x = 1 \iff g \cdot (by) + c_s \cdot (bx) = b.$$

注意, 对于任意 $k \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$, 有 $g \cdot (by + kc_s) + c_s \cdot (bx - kg) = b$. 我们需要 $by + kc_s > b_0$ 且 $bx - kg \geq 0$, 这等价于

$$\frac{bx}{g} \geq k > \frac{b_0 - by}{c_s}.$$

当 $b \geq g(b_0 + c_s)$ 时, 总能找到这样的整数 k . □

接下来我们利用这一引理证明不可约且非周期链的以下性质.

Bézout 恒等式是初等数论中的基本结论: 对于整数 a_1, \dots, a_s , 存在整数 x_1, \dots, x_s 使得 $a_1 x_1 + \dots + a_s x_s = \gcd(a_1, \dots, a_s)$.

命题 2.23.

设 $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是一个不可约且非周期的马尔可夫链. 则有

$$\exists t^*, \forall i, j \in [n]: P^{t^*}(i, j) > 0.$$

证明. 不可约的性质意味着 $\forall i, j, \exists t: P^t(i, j) > 0$. 假设从状态 i 出发并返回 i 的环路有 s 条, 其长度为 c_1, c_2, \dots, c_s . 根据非周期性, 我们有 $\gcd(c_1, c_2, \dots, c_s) = 1$.

对于任意足够大的 m 和任意状态对 (i, j) , 根据上述引理和不可约性, 存在从 i 到 j 的恰好 m 步的路径. 因此, 存在 $t^* > 0$, 使得对于任意状态对 (i, j) , $P^{t^*}(i, j) > 0$. 此外, 对于任何 $t > t^*$, $P^t(i, j) > 0$ 对任意 $i, j \in \Omega$ 都成立. \square

定理 2.10 的证明

我们已知 P 有一个平稳分布 π . 我们需要证明, 对于任意初始分布 μ_0 , 有

$$\lim_{t \rightarrow \infty} d_{TV}(\mu_t, \pi) = 0$$

成立. 这里 $\mu_t^\top = \mu_0^\top P^t$. 我们使用耦合引理, 通过构造 μ_t 和 π 的一个耦合, 来给出它们的全变差距离的一个上界. 为了方便阐述, 我们引入马尔可夫链的耦合的概念.

设 $(X_t)_{t \geq 0}, \{Y_t\}_{t \geq 0}$ 是两个马尔可夫链, 它们的转移矩阵分别是 P 和 Q . 我们说一个 (二元取值) 的随机过程 $(\bar{X}_t, \bar{Y}_t)_{t \geq 0}$ 是 $(X_t)_{t \geq 0}$ 和 $(Y_t)_{t \geq 0}$ 的耦合, 如果对于任意 $t \geq 1, \forall i, j$:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{(\bar{X}_t, \bar{Y}_t)}[\bar{X}_t = j \mid \bar{X}_{t-1} = i] &= P(i \rightarrow j) \\ \mathbb{P}_{(\bar{X}_t, \bar{Y}_t)}[\bar{Y}_t = j \mid \bar{Y}_{t-1} = i] &= Q(i \rightarrow j). \end{aligned}$$

换句话说, 如果我们单独盯着 \bar{X}_t 或者 \bar{Y}_t 看, 它的演化行为分别和 X_t 和 Y_t 是一样的. 如果我们用 μ_t 表示 X_t 的分布, 用 ν_t 表示 Y_t 的分布, 那么显然 (\bar{X}_t, \bar{Y}_t) 的分布是 μ_t 和 ν_t 的一个耦合.

请验证这件事!

我们用上面命题中的 t^* 来定义 $Q := P^{t^*}$. 由于 $Q(i, j) \geq \delta > 0$ 对于所有状态对 (i, j) 成立, 接下来我们对 Q -链 (即每 t^* 步观察一次的 P -链) 构造耦合. 设 $\{X_k\}$ 和 $\{Y_k\}$ 是两个 Q -链, 其中 $Y_0 \sim \pi$ 而 X_0 由任意分布 μ_0 生成. 我们构造 $(\bar{X}_k, \bar{Y}_k)_{k \geq 0}$ 如下:

注意 π 也是 Q 的平稳分布: $\pi^\top Q = \pi^\top P^{t^*} = \pi^\top$.

- 初始情况, 分别独立的从 μ_0 和 π 中采样: $\bar{X}_0 \sim \mu_0, \bar{Y}_0 \sim \pi$;
- 对于 $k \geq 1$, 如果 $\bar{X}_{k-1} = \bar{Y}_{k-1}$, 则令 $\bar{X}_k = \bar{Y}_k$ (一起按 Q 演化); 否则分别独立的按照 Q 从 \bar{X}_{k-1} 和 \bar{Y}_{k-1} 演化.

根据耦合引理, $d_{TV}(\mu_{kt^*}, \pi) \leq \mathbb{P}[\bar{X}_k \neq \bar{Y}_k]$. 现在我们估计碰撞概率. 当 $\bar{X}_{k-1} \neq \bar{Y}_{k-1}$ 时, 两链独立演化, 因此对于任意状态 j :

$$\mathbb{P}[\bar{X}_k = j \text{ 且 } \bar{Y}_k = j] = Q(\bar{X}_{k-1}, j) \cdot Q(\bar{Y}_{k-1}, j) \geq \delta^2.$$

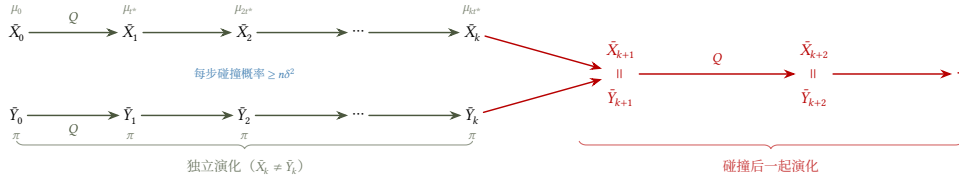


图 2.11: Q-链耦合示意图: 两条链独立演化直至碰撞, 此后一起移动

对 j 求和, 得到

$$\mathbb{P}[\bar{X}_k = \bar{Y}_k \mid \bar{X}_{k-1} \neq \bar{Y}_{k-1}] = \sum_j Q(\bar{X}_{k-1}, j) \cdot Q(\bar{Y}_{k-1}, j) \geq n\delta^2.$$

因此 $\mathbb{P}[\bar{X}_k \neq \bar{Y}_k] \leq (1 - n\delta^2) \cdot \mathbb{P}[\bar{X}_{k-1} \neq \bar{Y}_{k-1}]$, 归纳得到

$$\mathbb{P}[\bar{X}_k \neq \bar{Y}_k] \leq (1 - n\delta^2)^k.$$

最后, 我们还有以下引理.

引理 2.24.

对于任意 $t \geq 0$, 有 $d_{TV}(\mu_{t+1}, \pi) \leq d_{TV}(\mu_t, \pi)$ 成立.

证明. 我们使用耦合引理. 设 (X_t, Y_t) 是 μ_t 和 π 的最优耦合, 即 $\mathbb{P}[X_t \neq Y_t] = d_{TV}(\mu_t, \pi)$. 我们构造 (X_{t+1}, Y_{t+1}) 如下:

- 如果 $X_t = Y_t$, 则令 X_{t+1} 从 X_t 按 P 演化, 并令 $Y_{t+1} = X_{t+1}$;
- 如果 $X_t \neq Y_t$, 则令 X_{t+1} 和 Y_{t+1} 分别独立地从 X_t 和 Y_t 按 P 演化.

我们验证 (X_{t+1}, Y_{t+1}) 是 μ_{t+1} 和 π 的一个耦合. 首先, X_{t+1} 的边缘分布为 μ_{t+1} , 因为 $X_t \sim \mu_t$ 且 X_{t+1} 按 P 从 X_t 演化. 其次, Y_{t+1} 的边缘分布为 π , 因为在两种情况下 Y_{t+1} 都按 P 从某个 π -分布的随机变量演化, 由 π 的平稳性知 $Y_{t+1} \sim \pi$.

现在, $X_{t+1} \neq Y_{t+1}$ 只可能在 $X_t \neq Y_t$ 时发生 (因为当 $X_t = Y_t$ 时我们令 $Y_{t+1} = X_{t+1}$), 因此

$$\mathbb{P}[X_{t+1} \neq Y_{t+1}] \leq \mathbb{P}[X_t \neq Y_t] = d_{TV}(\mu_t, \pi).$$

由耦合引理, $d_{TV}(\mu_{t+1}, \pi) \leq \mathbb{P}[X_{t+1} \neq Y_{t+1}] \leq d_{TV}(\mu_t, \pi)$. □

结合上述耦合的指数衰减和 d_{TV} 的单调性, 对于任意 t , 取 $k = \lfloor t/t^* \rfloor$, 得

$$d_{TV}(\mu_t, \pi) \leq d_{TV}(\mu_{kt^*}, \pi) \leq (1 - n\delta^2)^k \rightarrow 0 \quad (t \rightarrow \infty).$$

这完成了定理 2.10 的证明.

第一种情况中, $Y_t = X_t$, 但 $Y_{t+1} = X_{t+1}$ 是从 X_t 按 P 演化的结果; 由于 $Y_t \sim \pi$ 且 $Y_t = X_t$, 这等价于从 π -分布出发按 P 演化.

2.6 马尔可夫链的收敛速率与混合时间 (mixing time)

我们现在开始研究马尔可夫链的收敛速率. 我们从混合时间的概念开始. 对于任意 $\varepsilon > 0$, 马尔可夫链 P 的 (误差不超过 ε) 的混合时间定义为最小的步数

t , 使得从任意初始分布运行马尔可夫链后, 其与平稳分布的全变差距离至多为 ε . 形式化地定义为:

$$\tau_{\text{mix}}(\varepsilon) := \min_t \sup_{\mu_0} d_{\text{TV}}(\mu_t, \pi) \leq \varepsilon.$$

在有的文献里, 人们会定义 $\tau_{\text{mix}} := \tau_{\text{mix}}(1/4)$, 并直接把 τ_{mix} 称为混合时间.

回忆刚才我们用耦合法证明马尔可夫链基本定理的时候, 我们用到了不等式

$$d_{\text{TV}}(\mu_t, \pi) \leq \mathbb{P}_{(\bar{X}_t, \bar{Y}_t)} [\bar{X}_t \neq \bar{Y}_t].$$

其中 (\bar{X}_t, \bar{Y}_t) 是一个耦合. 显然, 如果我们能够定量的控制上式右边的概率, 比如说证明对于任意初始的 (\bar{X}_0, \bar{Y}_0) , $\mathbb{P}_{(\bar{X}_t, \bar{Y}_t)} [\bar{X}_t \neq \bar{Y}_t] \leq \varepsilon$, 那么根据定义, 马上就能得到 $\tau_{\text{mix}}(\varepsilon) \leq t$. 换句话说

为什么这个不等式可以蕴含混合时间上界? 请自己严格证明.

一个好的耦合可以给出马尔可夫链的混合时间的好的上界

因此, 耦合法是我们将要介绍的证明马尔可夫链收敛速度上界的一个重要方法. 下面是几个例子.

超立方体上的随机游走

回忆我们在本章开头介绍过的超立方体上的随机游走 (参见图 2.4), 并且已经验证了其平稳分布是均匀分布. 现在我们考虑它的一个 lazy 版本. 状态空间为 $\Omega = \{\pm 1\}^n$, 当且仅当 $\|x - y\|_1 = 1$ 时, 状态 x 和 y 之间存在一条边. 我们从一个点 $X_0 \in \Omega$ 出发, 在每一步中, 如果当前的位置是 $X_t \in \{\pm 1\}^n$:

- 以概率 $\frac{1}{2}$ 保持不动;
- 否则, 随机选择一个 $i \in [n]$ 并翻转 $X_t(i)$ (即令 $X_t(i) \leftarrow -X_t(i)$).

这是个可逆马尔可夫链, 因此使用细致平衡条件即可简单验证其平稳分布为均匀分布.

这里以 $\frac{1}{2}$ 概率不动的主要目的是为了使得马尔可夫链非周期化. 在每个点上都加上自环的马尔可夫链也被称为 lazy chain.

现在我们用耦合分析该过程的混合时间. 我们可以把它每一步的移动写成下面这个等价形式.

- 随机选择一个 $i \in [n]$ 和一个 $b \in \{\pm 1\}$;
- 将 $X_t(i)$ 改为 b .

我们构造一组马尔可夫链的耦合 (X_t, Y_t) , 其中 X_0 和 Y_0 是任意状态. 构造方法是

两个随机游走 X_t 和 Y_t 在每一步选择相同的 i 和 b .

于是, 一旦某个位置 $i \in [n]$ 被选择, $X_t(i)$ 和 $Y_t(i)$ 将永远相同. 因此, 这个问题等价于我们研究过的奖券收集问题. 我们可以计算出对于 $t \geq n \log n + cn$, 未选择第 i 维的概率为:

$$\left(1 - \frac{1}{n}\right)^{n \log n + cn} \leq \frac{e^{-c}}{n}.$$

于是, 至少存在一个维度未被选择的概率不超过 e^{-c} . 我们希望这个概率小于 ε , 因此选择 $c > \log \frac{1}{\varepsilon}$. 于是,

$$\tau_{\text{mix}}(\varepsilon) \leq n \log \frac{n}{\varepsilon}.$$

接下来我们稍作修改, 将随机游走里每一步不动的概率由 $\frac{1}{2}$ 改为 $\frac{1}{n+1}$, 即以概率 $\frac{1}{n+1}$ 保持不动, 使得这个 lazy walk 略为活跃一点. 在这种情况下, 我们描述另一种 X_t 和 Y_t 的耦合方法. 我们总可以不失一般性的排列 X_t 和 Y_t 的坐标, 使得所有取值不同的坐标排在前面. 也就是说, 存在一个索引 k , 使得当 $1 \leq i \leq k$ 时, $X_t(i) \neq Y_t(i)$, 而当 $i > k$ 时, $X_t(i) = Y_t(i)$. 我们的耦合规则如下:

- 如果 $k = 0$, Y_t 的行为与 X_t 相同.
- 如果 $k = 1$, 当 X_t 翻转第一位时, Y_t 保持不动; 当 X_t 保持不动时, Y_t 翻转第一位; 其余时间两者行为一样.
- 如果 $k \geq 2$, 我们区分 X 是否翻转了 $[k]$ 中的位置:
 - 如果 X 保持不动或翻转了一个 $i > k$ 的位置: Y 的行为相同;
 - 如果 X 翻转了 $1 \leq i \leq k$: Y 翻转 $(i \bmod k) + 1$, 即将 $1 \mapsto 2, 2 \mapsto 3, \dots, k-1 \mapsto k, k \mapsto 1$.

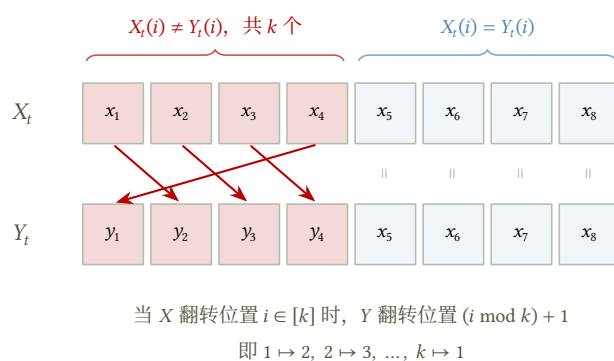


图 2.12: 超立方体耦合的坐标循环置换示意图 ($k = 4$ 的情形)

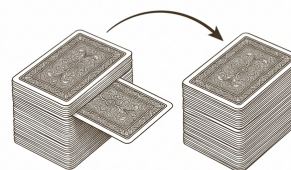
显然, 上述方法确实是一个耦合. 事实上, 这种耦合的行为类似于“倍速奖券收集问题”, 因为在 $k \geq 2$ 的情况下, 如果 $i \in [k]$, 我们每次可以“收集”两个奖券. 因此, 可以相信,

$$\tau_{\text{mix}} \leq \frac{1}{2} n \log n + O(n).$$

随机至顶 (random-to-top) 洗牌问题

给定一副 n 张牌的牌堆, 考虑以下洗牌规则:

- 随机抽取一张牌;
- 将这张牌放到牌堆的顶端.



这一洗牌规则可以视为在 $n!$ 种排列上的随机游走，且容易验证，均匀分布是其平稳分布。我们设计一个此马尔可夫链的耦合方法。即，设 X_t 和 Y_t 分别表示两副牌堆，我们通过以下方式构造 X_{t+1} 和 Y_{t+1} ：

抽取相同的牌。

注意，这里是抽取“相同的牌”，而不是位于相同位置的牌。换句话说，一旦我们在 X_t 中抽取了 $\heartsuit K$ ，我们也在 Y_t 中抽取 $\heartsuit K$ 。

显然，这是一个耦合，而且一旦某张牌（比如 $\heartsuit K$ ）被抽取过，那么 $\heartsuit K$ 在两副牌堆中的位置将始终相同。因此，如果我们问需要多少轮 T 使得 $X_T = Y_T$ ，这个问题就再次等价于奖券收集问题。我们有

$$\tau_{\text{mix}}(\varepsilon) \leq n \log \frac{n}{\varepsilon}.$$