第 20 讲 不变分布

设 P 是马氏链 $\{X_n\}$ 的转移概率矩阵，给定 X_0 的概率分布

$$\boldsymbol{\pi}^{(0)} = [\pi_1, \pi_2, \cdots].$$

我们知 X_n 的概率分布

$$\boldsymbol{\pi}^{(n)} = [\pi_1^{(n)}, \pi_2^{(n)}, \cdots],$$

其中 $\pi_j^{(n)} = P(X_n = j)$，满足

$$\boldsymbol{\pi}^{(n)} = \boldsymbol{\pi}^{(n-1)} P = \boldsymbol{\pi}^{(0)} P^n,\ n \geq 1.$$

命题 1.1

如果 $\boldsymbol{\pi}^{(1)} = \boldsymbol{\pi}^{(0)}$，则 $\boldsymbol{\pi}^{(n)} = \boldsymbol{\pi}^{(0)}$.

上面命题说明只要 $\boldsymbol{\pi}^{(1)} = \boldsymbol{\pi}^{(0)}$，则 X_n 和 X_0 同分布. 概率分布 $\boldsymbol{\pi}^{(1)} = \boldsymbol{\pi}^{(0)}$ 等价于 $\boldsymbol{\pi}^{(0)} = \boldsymbol{\pi}^{(0)} P$. 也等价于

$$\sum_{j \in I} \pi_j = 1, \ \pi_j = \sum_{k \in I} \pi_k p_{kj} \geq 0, \ j \in I. \tag{1.1}$$

定义 1.2

如果 $\boldsymbol{\pi} = [\pi_1, \pi_2, \cdots, \cdots]$ 满足 (1.1)，或等价地满足

$$\sum_{j \in I} \pi_j = 1, \ \ \pi = \pi P, \tag{1.2}$$

则称 $\boldsymbol{\pi}$ 是马氏链 $\{X_n\}$ 或转移矩阵 P 的不变分布.

定理 1.3

设 C^+ 是马氏链 $\{X_n\}$ 的所有正常返状态，$i \in C^+$.

(1) 如果 C^+ 是遍历等价类，则

$$\pi_j = \lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)} = 1/\mu_j, \ j \in I$$

是唯一不变分布.

(2) 如果 C^+ 是周期为 d 的等价类，则

$$\pi_j = \frac{1}{d} \lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(nd)} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{d} \sum_{s=1}^{d} p_{ij}^{(nd+s)} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} p_{ij}^{(k)}, \ j \in I$$

是唯一不变分布，且 $\pi_j = 1/\mu_j$；

(3) 若 C^+ 非空，则 $\{X_n\}$ 有唯一不变分布的充分必要条件是 C^+ 是等价类；

(4) $\{X_n\}$ 有不变分布的充分必要条件是 C^+ 非空；

(5) 状态有限的马氏链必有不变分布.

证明.

只对 C^+ 是有限集合的情形给出证明.

(1) 我们知

$$\pi_j = \lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)} = \begin{cases} 0, & j \notin C^+, \\ 1/\mu, & j \in C^+. \end{cases}$$

因为质点从 i 出发不能走出 C^+，所以有

$$\sum_{j\in I} p_{ij}^{(n)} = \sum_{j\in C^+} p_{ij}^{(n)} = 1.$$

令 $n\to\infty$，得到 $\sum_{j\in I}\pi_j = \sum_{j\in C^+}\pi_j = 1$. 再利用 K-C 方程得到

$$\begin{aligned}\pi_j &= \lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)} = \lim_{n\to\infty}\sum_{k\in C^+} p_{ik}^{(n-1)} p_{kj} \\ &= \sum_{k\in C^+} \pi_k p_{kj},\end{aligned}$$

上述等式说明 $\{\pi_j\}$ 是不变分布.

证明.
再证明唯一性. 如果 $\{\pi'_j\}$ 也是不变分布，则对于 $j \notin C^+$，我们有 $p_{kj}^{(n)} \to 0$. 由于 $\sum_{j\in I} \pi'_j = 1$，我们知对任意 $\varepsilon > 0$ 存在有限集 I' 使得 $\sum_{j\notin I'} \pi'_j < \varepsilon$. 同时存在 $N \in \mathbb{N}$ 使得当 $n > N$ 时有对于任意 $k \in I'$，$p_{kj}^{(n)} < \varepsilon$. 于是

$$\pi'_j = \sum_{k\in I} \pi'_k p_{kj}^{(n)} = \sum_{k\in I'} \pi'_k p_{kj}^{(n)} + \sum_{k\notin I'} \pi'_k p_{kj}^{(n)} < 2\varepsilon.$$

于是 $\pi'_j = 0 = \pi_j$. 对于 $j \in C^+$，由于

$$\pi'_j = \sum_{k\in I} \pi'_k p_{kj}^{(n)} = \sum_{k\in C^+} \pi'_k p_{kj}^{(n)} \to \Big(\sum_{k\in C^+} \pi'_k\Big)\pi_j = \pi_j,$$

所以 $\pi'_j = \pi_j$.

证明.

(2) 当 $j \notin C^+$ 时，我们知道这 3 个极限都是 0. 当 $j \in C^+$ 时，我们知这三个极限都是 $1/\mu_j$，于是

$$\pi_j = \begin{cases} 0, & j \notin C^+, \\ 1/\mu_j, & j \in C^+. \end{cases}$$

我们先验证 π_j 是不变分布. 注意 $i \in C^+$，我们有

$$\begin{aligned}
\pi_j &= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{d} \sum_{s=1}^{d} p_{ij}^{(nd+s)} \\
&= \lim_{n\to\infty} \sum_{s=1}^{d} \frac{1}{d} \sum_{k\in C^+} p_{ik}^{(nd+s-1)} p_{kj} \ (\text{用 } K-C \text{ 方程}) \\
&= \sum_{k\in C^+} \lim_{n\to\infty} \frac{1}{d} \sum_{s=1}^{d} p_{ik}^{(nd+s-1)} p_{kj} \\
&= \sum_{k\in C^+} \pi_k p_{kj} = \sum_{k\in I} \pi_k p_{kj}.
\end{aligned}$$

证明.

又由 $\sum_{j\in C^+} p_{ij}^{(nd+s)} = 1$，我们有

$$\sum_{j\in I}\pi_j = \sum_{j\in C^+}\pi_j = \sum_{j\in C^+}\lim_{n\to\infty}\frac{1}{d}\sum_{s=1}^{d} p_{ij}^{(nd+s)} = \lim_{n\to\infty}\frac{1}{d}\sum_{s=1}^{d}\sum_{j\in C^+} p_{ij}^{(nd+s)} = 1.$$

由上我们知 $\{\pi_j\}$ 是不变分布.

证明.

下面证明唯一性. 如果 $\{\pi'_k\}$ 也是不变分布，则对于 $j \notin C^+$，由命题 ?? 我们有

$$\pi'_j = \sum_{k\in I} \pi'_k p_{kj}^{(nd+s)} \to 0,\ n \to \infty,$$

于是 $\pi'_j = \pi_j = 0$. 于是 $j \in C^+$，我们有

$$\pi'_j = \sum_{k\in I} \pi'_k p_{kj}^{(nd+s)} = \sum_{k\in C^+} \pi'_k p_{kj}^{(nd+s)},\ s = 1, 2, \cdots, d.$$

两边对 s 求平均后，令 $n \to \infty$ 我们有

$$\pi'_j = \sum_{k\in C^+} \pi'_k \frac{1}{d} \sum_{s=1}^{d} p_{kj}^{(nd+s)} \to \sum_{k\in C^+} \pi'_k \pi_j = \pi_j.$$

故 $\pi'_j = \pi_j$.

证明.

(3) 如果 C^+ 是一个正常返等价类，由 (1) 和 (2) 我们知不变分布存在且唯一. 如果 C^+ 至少有两个正常返等价类 C_1, C_2. 在马氏链的分解中 C_1, C_2 对应的矩阵分别是 P_1，P_2，则按照本定理的 (1) 和 (2)，有分布列 $\boldsymbol{\pi}_1$ 和 $\boldsymbol{\pi}_2$ 使得

$$\boldsymbol{\pi}_1 = \boldsymbol{\pi}_1 P_1, \quad \boldsymbol{\pi}_2 = \boldsymbol{\pi}_2 P_2.$$

对于任意 $p = 1 - q \in [0,1]$，定义

$$\boldsymbol{\pi} = [p\boldsymbol{\pi}_1, q\boldsymbol{p}_2, 0, \cdots, 0], \tag{1.3}$$

回顾

$$\begin{array}{c} \\ C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_m \\ T \end{array}
\begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} C_1 & C_2 & \cdots & C_{m-1} & C_m & T \end{array} \\
\begin{pmatrix} P_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & P_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & P_m & 0 \\ R_1 & R_2 & \cdots & R_{m-1} & R_m & Q_T \end{pmatrix} \end{array} = P. \tag{1.4}$$

证明.
则对于 (1.4) 定义的 P，我们有

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\pi} P &= [p\boldsymbol{\pi}_1, q\boldsymbol{\pi}_2, 0, \cdots, 0]
\begin{pmatrix}
C_1 & P_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\
C_2 & 0 & P_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\
C_m & 0 & 0 & \cdots & 0 & P_m & 0 \\
T & R_1 & R_2 & \cdots & R_{m-1} & R_m & Q_T
\end{pmatrix} \\
&= [p\boldsymbol{\pi}_1 P_1, q\boldsymbol{\pi}_2 P_2, 0, \cdots, 0] \\
&= [p\boldsymbol{\pi}_1, q\boldsymbol{\pi}_2, 0, \cdots, 0] \\
&= \boldsymbol{\pi}.
\end{aligned}
$$

这说明任何组合 (1.3) 都是不变分布，即不变分布有无穷个.

证明.

(4) 当 C^+ 非空时，它就至少有一个正常返等价类，由 (3) 我们知不变分布存在. 如果 C^+ 是空集，那么我们知对任意 $i.j \in I$，有 $p_{kj}^{(n)} \to 0$. 设 $\boldsymbol{\pi}$ 是不变分布，则由 $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi} P$ 得到 $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi} P^{(n)}$，从而得到

$$\pi_j = \sum_{k \in I} \pi_k p_{kj}^{(n)} \to 0, \ n \to \infty.$$

这与 $\sum_{j \in I} \pi_j = 1$ 矛盾.

(5) 有限状态马氏链至少有一个正常返状态，由 (4) 我们知不变分布必然存在. □

命题 1.4

设 $P=(P_1,P_2,\cdots,P_m)$ 是马氏链的一步转移概率矩阵，P_j 是 P 的第 j 列，则方程组

$$\boldsymbol{\pi}=\boldsymbol{\pi}P,\ \sum_{j=1}^{m}\pi_j=1 \tag{1.5}$$

和

$$[\pi_1,\pi_2,\cdots,\pi_{m-1}]=\boldsymbol{\pi}(P_1,P_2,\cdots,P_{m-1}),\ \sum_{j=1}^{m}\pi_j=1 \tag{1.6}$$

有相同的解.

证明.

(1.5) 的方程数比 (1.6) 多一个，所以 (1.5) 的解也是 (1.6) 的解. 如果 $\boldsymbol{\pi}$ 满足 (1.6)，对 $j=1,2,\cdots,m-1$ 有 $\pi_j=\boldsymbol{\pi}P_j$，于是由

$$\sum_{j=1}^{m}\pi_j=1,\ \sum_{j=1}^{m}P_j=\mathbf{1},\ \pi\mathbf{1}=1,$$

其中 $\mathbf{1}$ 表示元素都是 1 的向量，我们得到

$$\boldsymbol{\pi}P_m=\boldsymbol{\pi}(\mathbf{1}-\sum_{j=1}^{m-1}P_j)=1-\sum_{j=1}^{m-1}\boldsymbol{\pi}P_j=1-\sum_{j=1}^{m-1}\pi_j=\pi_m,$$

从而得证. □

例 2.1

设马氏链的状态空间是 $I=\{1,2\}$，转移矩阵是

$$P=\begin{pmatrix} 3/4 & 1/4 \\ 5/8 & 3/8 \end{pmatrix}.$$

(1) 计算不变分布 π 和极限 $\lim_{n\to\infty} P^n$；

(2) 计算状态 $1,2$ 的期望返回时间 μ_1,μ_2.

解.

(1) 马氏链互通，是一个遍历等价类. 解方程

$$\begin{cases} p_1 = \frac{3}{4}p_1 + \frac{5}{8}p_2, \\ p_1 + p_2 = 1 \end{cases}$$

得到不变分布 $\boldsymbol{\pi} = (5/7, 2/7)$. 由于马氏链是遍历的，由定理 1.3 (1) 我们有

$$\lim_{n\to\infty} P^n = \lim_{n\to\infty} \begin{pmatrix} P_{11}^{(n)} & p_{12}^{(n)} \\ p_{21}^{(n)} & p_{22}^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pi_1 & \pi_2 \\ \pi_1 & \pi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5/7 & 2/7 \\ 5/7 & 2/7 \end{pmatrix}.$$

(2) 根据公式 $\pi_j = 1/\mu_j$ 我们有 $\mu_1 = 7/5$，$\mu_2 = 7/2$. □

例 2.2: Ehrenfest 模型

容器内有 $2a$ 个粒子，一张薄膜将该容器分成对称的 A，B 两部分. 将粒子穿过薄膜时占用的时间忽略不计. 用 X_0 表示初始时 A 中的粒子数，X_n 表示有 n 个粒子穿过薄膜后 A 中的粒子数，X_n 表示有 n 个粒子穿过薄膜后 A 中的粒子数. 当所有粒子以相同的规律独立行动时，$\{X_n\}$ 是马氏链，有状态空间 $I=\{0,1,2,\cdots,2a\}$. 设马氏链 $\{X_n\}$ 有转移概率

$$p_{ij}=\begin{cases}\dfrac{2a-i}{2a}, & 0\le i\le 2a-1,\ j=i+1,\\ \dfrac{i}{2a}, & 1\le i\le 2a,\ j=i-1,\\ 0, & \text{其他}.\end{cases}$$

计算该马氏链的不变分布.

解.
从问题的背景知道这是一个正常返马氏链，周期等于 2，不变分布唯一存在.
补充定义 $\pi_{-1} = \pi_{2a+1} = 0$，可将方程组 $\pi = \pi P$ 写成

$$\pi_i = \pi_{i-1} p_{i-1,i} + \pi_{i+1} p_{i+1,i}, \ 0 \le i \le 2a.$$

于是有

$$\pi_{i+1} = \frac{\pi_i - \pi_{i-1} p_{i-1,i}}{p_{i+1,i}}.$$

解.
经过计算依次得到

$$
\begin{aligned}
\pi_1 &= \frac{\pi_0}{p_{10}} = 2a\pi_0 = C_{2a}^1\pi_0, \\
\pi_2 &= \frac{\pi_1 - \pi_0 p_{01}}{p_{21}} = (\pi_1 - \pi_0)2a/2 = (2a-1)a\pi_0 = C_{2a}^2\pi_0, \\
\pi_3 &= \frac{\pi_2 - \pi_1 p_{12}}{p_{32}} = (\pi_2 - \pi_1 p_{12})2a/3 = C_{2a}^3\pi_0, \\
&\cdots\cdots \\
\pi_a &= C_{2a}^{2a}\pi_0.
\end{aligned}
$$

解.

利用 $\pi_0 + \pi_1 + \cdots + \pi_{2a} = 2^{2a}\pi_0 = 1$ 得到 $\pi_0 = 2^{-2a}$. 最后得到不变分布

$$\pi_i = C_{2a}^i \left(\frac{1}{2}\right)^i \left(\frac{1}{2}\right)^{2a-i}, \ 0 \le i \le 2a.$$

这是二项分布 $\mathcal{B}(2a, 1/2)$，表明在不变分布下或时间充分长之后，个粒子的位置是相互独立的，每个粒子位于 A 中的概率是 $1/2$. $\square$