

平稳性

平稳可逆性

平稳可逆分布的计
算

马尔可夫链蒙特卡
洛方法

第 20 讲 平稳性和平稳可逆性

平稳性

平稳可逆性

平稳可逆分布的计算

马尔可夫链蒙特卡洛方法

平稳性

平稳可逆性

平稳可逆分布的计
算

马尔可夫链蒙特卡
洛方法

设 $\{X_n\}$ 有不变分布 $\pi = [\pi_1, \pi_2, \dots]$. 当不变分布 π 是 X_0 的初始分布时, 对 $n = 1, 2, \dots$ 有

$$P(X_n = j) = \pi_j^{(n)} = \pi_j = P(X_0 = j).$$

这时 X_n 的概率分布不随 n 变化.

命题 1.1

对于任意 $m, n \geq 1$, 随机向量

$$\xi_n = (X_n, X_{n+1}, \dots, X_{n+m}) \text{ 和 } \xi_0 = (X_0, X_1, \dots, X_m)$$

有相同的联合分布.

证明.

对于事件

$$A_k = \{X_{n+k} = i_k\}, B_k = \{X_k = i_k\}, k = 0, 1, \dots, m,$$

有 $P(A_0) = P(X_n = i_0) = P(X_0 = i_0) = P(B_0)$. 对于 $k = 1, 2, \dots, m$, 由时齐性我们有

$$P(A_k | A_0 A_1 \cdots A_{k-1}) = P(X_k = i_k | X_{k-1} = i_{k-1}) = P(B_k | B_0 B_1 \cdots B_{k-1}).$$

再利用乘法公式我们有

$$\begin{aligned} P(X_n = i_0, X_{n+1} = i_1, \dots, X_{n+m} = i_m) &= P(A_0 A_1 \cdots A_m) \\ &= P(A_0) P(A_1 | A_0) \cdots P(A_m | A_0 A_1 \cdots A_{m-1}) \\ &= P(B_0) P(B_1 | B_0) \cdots P(B_m | B_0 B_1 \cdots B_{m-1}) \\ &= P(B_0 B_1 \cdots B_m) \\ &= P(X_0 = i_0, X_1 = i_1, \dots, X_m = i_m). \end{aligned}$$

所以 ξ_n 和 ξ_0 同分布. □

平稳性

平稳可逆性

平稳可逆分布的
计算

马尔可夫链蒙特卡
洛方法

定义 1.2

设 $\{X_n\}$ 是随机序列. 如果对于任何 $m, n \geq 1$, 随机向量

$$\xi_n = (X_n, X_{n+1}, \dots, X_{m+n}) \text{ 和 } \xi_0 = (X_0, X_1, \dots, X_m)$$

同分布, 则称 $\{X_n\}$ 是**严平稳序列**, 简称为**平稳序列**.

平稳性

平稳可逆性

平稳可逆分布的计
算马尔可夫链蒙特卡
洛方法

前面的分析说明, 如果马氏链 $\{X_n\}$ 以不变分布 π 为初始分布:
 $P(X_0 = j) = \pi_j (j \in I)$, 则 $\{X_n\}$ 是严平稳序列, 正因为这个原因, 人们又称
不变分布为 **平稳分布**或 **平稳不变分布**.

回忆非周期不可约正常返马氏链被称为遍历马氏链.

命题 1.3

设遍历马氏链 $\{X_n\}$ 的初始分布是平稳不变分布 π , 马氏链 $\{Y_n\}$ 的转移概率和 $\{X_n\}$ 的转移概率相同, 则对任意 $m \geq 1$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(Y_n = i_0, Y_{n+1} = i_1, \dots, Y_{m+n} = i_m) = P(X_0 = i_0, X_1 = i_1, \dots, X_m = i_m).$$

证明.

用 p_{ij} 表示转移概率. 对任意 j 利用 $\sum_{i \in I} P(Y_0 = i) = 1$ 以及 $\lim_{n \rightarrow \infty} p_{ij}^{(n)} = \pi_j$ 得到

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(Y_n = j) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i \in I} P(Y_0 = i) p_{ij}^{(n)} = \sum_{i \in I} P(Y_0 = i) \pi_j = \pi_j.$$

于是

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} P(Y_n = i_0, Y_{n+1} = i_1, \dots, Y_{n+m} = i_m) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} P(Y_n = i_0) p_{i_0 i_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_{m-1} i_m} \\ &= \pi_{i_0} p_{i_0 i_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_{m-1} i_m} \\ &= P(X_0 = i_0, X_1 = i_1, \dots, X_m = i_m). \end{aligned}$$

□

当马氏链是平稳序列时, 称马氏链处于平稳状态. 上面命题结论说明, 对于遍历马氏链, 随着时间的推移马氏链 $\{Y_n\}$ 趋于稳定状态.

平稳性

平稳可逆性

平稳可逆分布的计算

马尔可夫链蒙特卡洛方法

平稳性

平稳可逆性

平稳可逆分布的计
算

马尔可夫链蒙特卡
洛方法

如果 $\{X_n\}$ 是以 $\{\pi_i\}$ 为不变分布的马氏链, 有转移概率矩阵 $P = (p_{ij})$, 对于 $n > m \geq 0$, 因为已知现在 $B = \{X_m = i\}$ 时, 过去 $A = \{X_{m-1} = j\}$ 与将来 $C = \{X_{m+1} = i_{m+1}, X_{m+2} = i_{m+2}, \dots, X_n = i_n\}$ 独立, 所以有

$$P(A|BC) = P(A|B).$$

利用 X_n 和 X_0 同分布得到

$$\begin{aligned} & P(X_{m-1} = j | X_m = i, X_{m+1} = i_{m+1}, \dots, X_n = i_n) \\ &= P(X_{m-1} = j | X_m = i) = \frac{P(X_{m-1} = j, X_m = i)}{P(X_m = i)} = \frac{\pi_j p_{ji}}{\pi_i}. \end{aligned}$$

上式只与 i, j 有关, 与 m 无关. 这说明把时间倒过来看, $\{X_n\}$ 也具有马氏性, 一步转移概率是

$$p_{ij}^* = P(X_0 = j | X_i = i) = \frac{\pi_j p_{ji}}{\pi_i}, \quad m \geq 0.$$

如果这个转移概率也等于 p_{ij} , 则由 $p_{ij}^* = p_{ij}$ 我们可以得到

$$\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji}, \quad i, j \in I. \quad (2.1)$$

定义 2.1

设马氏链 $\{X_n\}$ 有的一步转移概率矩阵 $P = (p_{ij})$.

- (1) 如果有不全为零的非负数列 $\eta = \{\eta_i\}$, 使得

$$\eta_i p_{ij} = \eta_j p_{ji}, \quad i, j \in I$$

成立, 则称 $\{X_n\}$ 是对称马氏链, 称 η 为 $\{X_n\}$ 或 P 的对称化序列. 特别当概率分布 $\pi = \{\pi_i\}$ 使得

$$\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji}, \quad i, j \in I,$$

称 π 为 $\{X_n\}$ 或 P 的可逆分布或平稳可逆分布.

- (2) 若 $\{Y_n\}$ 是平稳序列, 且对于任何 $n > m \geq 0$, 随机向量

$$(Y_m, Y_{m+1}, \dots, Y_{n-1}, Y_n) \text{ 和 } (Y_n, Y_{n-1}, \dots, Y_{m+1}, Y_m)$$

同分布, 则称 $\{Y_n\}$ 是时间可逆的平稳序列或平均可逆序列;

- (3) 若马氏链 $\{X_n\}$ 是平稳可逆序列, 则称 $\{X_n\}$ 为可逆马氏链.

显然, 当 $\{X_n\}$ 有对称化序列 η 时, 只要 $\sum_{j \in I} \eta_j < \infty$, 则可以得到 $\{X_n\}$ 的平稳可逆分布

$$\pi_i = \frac{\eta_i}{\sum_{j \in I} \eta_j}, \quad i \in I.$$

如果 $\{X_n\}$ 是可逆马氏链, 则将时间的方向倒过来看, 质点的运动规则不发生变化, 有相同的转移概率且任何 X_n 和 X_0 同分布.

下面的命题说明平稳可逆分布使得马氏链成为平稳可逆序列.

命题 2.2

设马氏链 $\{x_n\}$ 有转移概率 $\{p_{ij}\}$ 和平稳可逆分布 π , 则

- (1) π 是 $\{X_n\}$ 的平稳不变分布;
- (2) 当 $\{X_n\}$ 的初始分布为 π 时, $\{X_n\}$ 是可逆马氏链.

证明.

(1) 在 (2.1) 的两边对于 j 求和, 就得到

$$\pi_i = \pi_i \sum_{j \in I} p_{ij} = \sum_{j \in I} \pi_j p_{ji}, \quad i \in I.$$

这说明平稳可逆分布 π 是平稳不变分布.

(2) 当 $P(X_0 = i) = \pi_i$ 时, 对于任何 $n = m + 1$, 有

$$\begin{aligned} P(X_{m+1} = i, X_m = j) &= \pi_j p_{ji} = \pi_i p_{ij} \\ &= P(X_m = i, X_{m+1} = j). \end{aligned}$$

这说明定义 2.1 (2) 中条件对 $n = m + 1$ 成立. 对于 $n = m + 2$, 我们有

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

这说明定义 2.1 (2) 中条件对 $n = m + 2$ 成立. 用完全同样的方法可以证明定义 2.1 (2) 中条件对一般的 n 成立. □

平稳性

平稳可逆性

平稳可逆分布的
计算马尔可夫链蒙特卡
洛方法

命题 2.3

如果 $\{\eta_j\}$ 是互通马氏链的对称化序列, 则所有的 $\eta_j > 0$.

证明.

设 $\eta_i > 0$. 对于任何 j , 如果 $p_{ij} > 0$, 则从 $\eta_j p_{ji} = \eta_i p_{ij} > 0$ 得到 $\eta_j > 0$; 如果 $p_{ii_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_k j} > 0$, 则依次得到

$$\begin{aligned}\eta_{i_1} p_{i_1 i} &= \eta_i p_{ii_1} > 0, \eta_{i_1} > 0, \\ \eta_{i_2} p_{i_2 i_1} &= \eta_{i_1} p_{i_1 i_2} > 0, \eta_{i_2} > 0, \\ &\dots\dots\dots \\ \eta_j p_{ji_k} &= \eta_{i_k} p_{i_k j} > 0, \eta_j > 0.\end{aligned}$$

□

定理 3.1

设互通马氏链 $\{X_n\}$ 以平稳不变分布 π 为初始分布.

- (1) $\{X_n\}$ 是可逆马氏链的充分必要条件是对于任何 $i, i_1, i_2, \dots, i_k \in I$, 有

$$p_{ii_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_k i} = p_{i i_k} p_{i_k i_{k-1}} \cdots p_{i_1 i}; \quad (3.1)$$

- (2) 当 $\{X_n\}$ 是平稳可逆序列, 对于取定的 i 以及从 i 到 j 的通路 $i \rightarrow i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \cdots \rightarrow i_k \rightarrow j$ (意指 $p_{ii_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_k j} > 0$). 定义

$$\eta_i = 1, \quad \eta_j = \frac{p_{ii_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_k j}}{p_{j i_k} p_{i_k i_{k-1}} \cdots p_{i_1 i}}, \quad j \neq i, \quad (3.2)$$

则 $\{\eta_j\}$ 是 $\{X_n\}$ 的对称化序列.

条件 (3.1) 称为 柯尔莫哥洛夫条件.

证明.

(1) 由乘法公式, 我们有

$$\begin{aligned} & P(X_0 = i, X_1 = i_1, X_2 = i_2, \dots, X_k = i_k, X_{k+1} = i) \\ &= \pi_i p_{ii_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_{k-1} i_k} p_{i_k i}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & P(X_{k+1} = i, X_k = i_1, \dots, X_1 = i_k, X_0 = i) \\ &= P(X_0 = i, X_1 = i_k, X_2 = i_k - 1, \dots, X_k = i_1, X_{k+1} = i) \\ &= \pi_i p_{ii_k} p_{i_k i_{k-1}} \cdots p_{i_2 i_1} p_{i_1 i}. \end{aligned}$$

如果 $\{X_n\}$ 是可逆马氏链, 则平稳可逆序列, 上面两式的左边相等, 于是右边也相等, 这就得到了 (3.1).

证明.

反过来, 如果 (3.1) 成立, 上面两式右边相等, 从而左边也相等. 在上述两式的两边对 i_1, i_2, \dots, i_{k-1} 求和, 得到

$$P(X_0 = i, X_k = i_k, X_{k+1} = i) = P(X_{k+1} = i, X_1 = i_k, X_0 = i).$$

把 i_k 改成 j , 得到

$$p_{ij}^{(k)} p_{ji} = p_{ij} p_{ji}^{(k)}.$$

两边对于 k 求平均得到

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n p_{ij}^{(k)} p_{ji} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n p_{ij} p_{ji}^{(k)}.$$

因为马氏链互通且具有平稳分布, 所以是正常返的. 令 $n \rightarrow \infty$. 我们有 $\pi_j p_{ji} = \pi_i p_{ij}$, 这说明 $\{\pi_i\}$ 是平稳可逆分布.

证明.

- (2) 这时 (3.1) 成立, 先说明 (3.2) 中的 η_j 和通路的选择无关, 实际上对于 i 到 j 的另外一条通路 $i \rightarrow j_1 \rightarrow j_2 \rightarrow \cdots \rightarrow j_s \rightarrow j$, 从 (3.1) 我们知道下式左边的分子成衣右边的分母等于右边的分子乘以左边的分母, 即有

$$\frac{p_{ii_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_{k-1} i_k} p_{i_k j}}{p_{j i_k} p_{i_k i_{k-1}} \cdots p_{i_2 i_1} p_{i_1 i}} = \frac{p_{i j_1} p_{j_1 j_2} \cdots p_{j_s j}}{p_{j j_s} p_{j_s j_{s-1}} \cdots p_{j_1 i}},$$

这就证明了 η_j 和通路的选择无关.

对于 i 到 j 的通路 $i \rightarrow i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \cdots i_k \rightarrow j$ 和 i 到 j 的道路 $i \rightarrow j_1 \rightarrow j_2 \rightarrow \cdots \rightarrow j_s \rightarrow i$, 还用上面交叉相乘的方法得到

$$\begin{aligned} \eta_j p_{j l} &= \frac{p_{ii_1} p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_{k-1} i_k} p_{i_k j} p_{j l}}{p_{j i_k} p_{i_k i_{k-1}} \cdots p_{i_2 i_1} p_{i_1 i}} \\ &= \frac{p_{i j_1} p_{j_1 j_2} \cdots p_{j_s l} p_{l j}}{p_{j j_s} p_{j_s j_{s-1}} \cdots p_{j_1 i}} = \eta_l p_{l j}. \end{aligned}$$

这说明 $\{\eta_j\}$ 是对称化序列.



定理 3.2

互通马氏链 $\{X_n\}$ 存在对称化序列的充分必要条件是对于任何 $i, i_1, i_2, \dots, i_k \in I$, 有 (3.1) 成立. 当 $\{X_n\}$ 存在对称化序列时, 对于任意取定的 i , 定义 $\eta_i = 1$ 时, 由 (3.2) 定义的 $\{\eta_j\}$ 是 $\{X_n\}$ 的对称化序列.

对于互通的马氏链, 下面是计算可逆分布的步骤:

- (1) 验证条件 (3.1) 成立后, 用 (3.2) 计算对称化序列 $\{\eta_j\}$; 或者先按 (3.2) 计算 $\{\eta_j\}$, 再验证 $\{\eta_j\}$ 满足 $\eta_j p_{jk} = \eta_k p_{kj}$, $j, k \in I$. 如满足, 则 $\{\eta_j\}$ 是对称化序列; 否则没有对称化序列, 也就没有可逆分布.
- (2) $\{\eta_j\}$ 是对称化序列时, 如果 $c = \sum_{j \in I} \eta_j < \infty$, 则 $\pi_j = \eta_j / c (j \in I)$ 是平稳可逆分布, 马氏链是正常返的; 否则马氏链不是正常返的, 平稳可逆分布不存在.

这里只需要对满足 (3.2) 的对称化序列证明当 $\sum_{j \in J} \eta_j = \infty$ 时, 马氏链不是正常返的. 用反证法, 如果 $\{X_n\}$ 是正常返的, 因为对称化序列存在, 所以条件 (3.1) 成立, 于是 $\{X_n\}$ 有可逆分布 $\{\pi_j\}$ 满足 $\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji}$, $i, j \in I$. 由此得到 $p_{ij} > 0$ 当且仅当 $p_{ji} > 0$, 并且对通路 $i \rightarrow i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \cdots \rightarrow i_k \rightarrow j$, 由 $\pi_j p_{ji_k} = \pi_{i_k} p_{i_k j}$, $\pi_{i_k} p_{i_k i_{k-1}} = \pi_{i_{k-1}} i_k$, \cdots , 得到

$$\pi_j = \pi_i \eta_j.$$

这就得到了矛盾的结果 $1 = \sum_{j \in I} \pi_j = \pi_i \sum_{j \in I} \eta_j = \infty$.

例 3.3

证明两端为反射壁的简单随机游动是可逆马氏链，并计算对称化序列和平稳可逆分布.

证明.

由于质点每次只能向左或向右走一步, 引入

$$\eta_0 = 1,$$

$$\eta_i = \frac{p_{01}p_{12} \cdots p_{i-1,i}}{p_{10}p_{21} \cdots p_{i,i-1}} = \frac{p^{i-1}}{q^i}, \quad 1 \leq i \leq n-1,$$

$$\eta_n = \frac{p_{01}p_{12} \cdots p_{n-1,n}}{p_{10}p_{21} \cdots p_{n,n-1}} = \frac{p^{n-1}}{q^{n-1}}.$$

可以如下验证 $\{\eta_i\}$ 是对称化序列,

$$\eta_0 p_{01} = 1 = \frac{p^0}{q^1} q = \eta_1 p_{10},$$

$$\eta_i p_{i,i+1} = \frac{p^{i-1}}{q^i} p = \frac{p^i}{q^{i+1}} q = \eta_{i+1} p_{i+1,i}, \quad 1 \leq i \leq n-2,$$

$$\eta_{n-1} p_{n-1,n} = \frac{p^{n-2}}{q^{n-1}} p = \frac{p^{n-1}}{q^{n-1}} \times 1 = \eta_n p_{n,n-1}.$$

平稳性

平稳可逆性

平稳可逆分布的
计算马尔可夫链蒙特卡
洛方法

例 3.4

质点在 $I = \{0, 1, \dots\}$ 中作随机游动, 有转移概率

$$p_{ij} = \begin{cases} p_i, & \text{当 } j = i + 1, i \geq 0, \\ 1 - p_i, & \text{当 } j = i - 1, i \geq 1, \end{cases}$$

其中 $p_{01} = p_0 = 1$, 当 $i > 1$ 时, $p_i \in (0, 1)$.

- (1) 证明转移概率 $\{p_{ij}\}$ 存在对称化序列 η_i ;
- (2) 求转移概率 $\{p_{ij}\}$ 有平稳可逆分布的充分必要条件;
- (3) 给出 $\{p_{ij}\}$ 有平稳不变分布的充分必要条件.

证明.

(1) 质点每次只能向左或向右走一步. 设 $q_i = 1 - p_i$, 引入

$$\eta_0 = 1,$$

$$\eta_i = \frac{p_{01}p_{12} \cdots p_{i-1,i}}{p_{10}p_{21} \cdots p_{i,i-1}} = \frac{p_0 p_1 \cdots p_{i-1}}{q_1 q_2 \cdots q_i}, \quad i \geq 1.$$

可以如下验证 $\{\eta_i\}$ 是对称化序列:

$$\eta_0 p_{01} = 1 = \frac{p_0}{q_1} q_1 = \eta_1 p_{10},$$

$$\eta_i p_{i,i+1} = \frac{p_0 p_1 \cdots p_{i-1}}{q_1 q_2 \cdots q_i} p_i = \frac{p_0 p_1 \cdots p_i}{q_1 q_2 \cdots q_{i+1}} q_{i+1}$$

$$= \eta_{i+1} p_{i+1,i}, \quad i \geq 1.$$

- (2) 如果 $c \equiv \eta_0 + \eta_1 + \cdots < \infty$, 则 $\pi_i = \eta_i/c$ 是平稳可逆分布; 否则马氏链不是正常返的, 平稳可逆分布不存在, 所以 $\{p_{ij}\}$ 由平稳可逆分布的充分必要条件是 $c < \infty$.
- (3) 由 (2) 知道马氏链正常返的充分必要条件是 $c < \infty$, 所以存在平稳不变分布的充分必要条件也是 $c < \infty$. □

平稳性

平稳可逆性

平稳可逆分布的
计算马尔可夫链蒙特卡
洛方法

例 3.5

直线, 平面和空间中的简单对称随机游动有对称化序列 $\eta_j = 1, j \in I$, 但是没有平稳可逆分布.

证明.

从 $p_{ij} = p_{ji}$ 和 $\sum_{j \in I} \eta_j = \infty$ 得到结论.

□

令 X 是一个离散的随机向量, 它的可能值的集合是 $\{x_j, j \geq 1\}$. 令 X 的概率质量函数为 $P\{X = x_j\}, j \geq 1$, 并假设我们想对某些特殊的函数 h 计算

$$\theta = E[h(X)] = \sum_{j=1}^{\infty} h(x_j)P\{X = x_j\}.$$

在难以计算函数 $h(x_j)(j \geq 1)$ 的情况下, 我们常常转为用模拟来近似 θ . 通用的方法, 称为**蒙特卡洛方法**, 是利用随机数生成概率质量函数为 $P\{X = x_j\}(j \geq 1)$ 的独立同分布的部分随机向量序列 X_1, X_2, \dots, X_n . 由强大数定律可得

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) = \theta, \quad (4.1)$$

因此我们可以取很大的 n , 用 $h(X_i)(i = 1, \dots, n)$ 的平均值作为估计量去估计 θ .

然而, 通常很难生成具有特定的概率质量函数的随机向量。特别是当 X 是一个分量之间有相依关系的随机向量。此外, 它的概率质量函数有时取 $P\{X = x_j\} = Cb_j (j \geq 1)$ 的形式, 其中 b_j 是指定的, 但是 C 必须计算, 而在很多应用中, 用对 b_j 求和确定 C 在计算上并不可行。幸而, 在这种情形下还存在一种利用模拟估计 θ 的方法。这种方法不是生成独立的随机向量, 而是生成一个取向量值的, 且以 $P\{X = x_j\} (j \geq 1)$ 为平稳概率的马尔可夫链 X_1, X_2, \dots 的相继状态的序列。如果这可以做到, 那么 (4.1) 仍然成立, 这意味着我们可以用 $\sum_{i=1}^n h(X_i)/n$ 作为 θ 的估计量。

现在我们说明如何生成一个具有任意平稳概率的马尔可夫链, 而此平稳概率可以只特定到一个常数倍数. 令 $b(j) (j = 1, 2, \dots)$ 为正数, 它们的和 $B = \sum_{j=1}^{\infty} b(j)$ 是有限的. 下面的**黑斯廷斯—梅特罗波里斯算法**. 可以用于生成一个时间可逆的马尔可夫链, 使其平稳概率是

$$\pi(j) = b(j)/B, \quad j = 1, 2, \dots$$

首先令 Q 是任意一个特定的不可约马尔可夫链转移概率矩阵, $q(i, j)$ 表示 Q 的第 i 行 j 列的元素. 现在按下述方式定义一个马尔可夫链 $\{X_n, n \geq 0\}$. 当 $X_n = i$ 时, 生成一个随机变量 Y 使 $P\{Y = j\} = q(i, j), j = 1, 2, \dots$. 如果 $Y = j$, 那么令 $X_{n+1} = j$ 以概率 $\alpha(i, j)$, 而以概率 $1 - \alpha(i, j)$ 等于 i . 在这些条件下, 容易看出状态序列构成一个马尔可夫链, 其转移概率 $P_{i,j}$ 为

$$P_{i,j} = q(i, j)\alpha(i, j), \quad \text{若 } j \neq i;$$
$$P_{i,i} = q(i, i) + \sum_{k \neq i} q(i, k)(1 - \alpha(i, k)).$$

如果

$$\pi(i)P_{i,j} = \pi(j)P_{j,i}, \quad \text{对于 } j \neq i,$$

则这个马尔可夫链是时间可逆的, 且具有平稳概率 $\pi(j)$, 上式等价于

$$\pi(i)q(i, j)\alpha(i, j) = \pi(j)q(j, i)\alpha(j, i). \quad (4.2)$$

但是如果我们取 $\pi(j) = b(j)/B$, 并且令

$$\alpha(i, j) = \min \left(\frac{\pi(j)q(j, i)}{\pi(i)q(i, j)}, 1 \right), \quad (4.3)$$

那么容易看出式 (4.2) 成立. 因为若

$$\alpha(i, j) = \frac{\pi(j)q(j, i)}{\pi(i)q(i, j)},$$

则 $\alpha(j, i) = 1$, 随之有式 (4.2). 而若 $\alpha(i, j) = 1$, 则

$$\alpha(j, i) = \frac{\pi(i)q(i, j)}{\pi(j)q(j, i)}.$$

式 (4.2) 也成立, 从而证明了这个马尔可夫链是时间可逆的, 且具有平稳概率 $\pi(j)$. 此外, 因为 $\pi(j) = b(j)/B$, 所以由式 (4.3) 可得

$$\alpha(i, j) = \min \left(\frac{b(j)q(j, i)}{b(i)q(i, j)}, 1 \right),$$

这表明 B 的值对于确定这个马尔可夫链并不是必需的, 因为 $b(j)$ 的值已经足够了. 此外, 几乎总出现下面的情形: $\pi(j) (j \geq 1)$ 不仅是平稳概率, 而且是极限概率. (事实上, 一个充分条件是, 对某个 i 有 $P_{i,i} > 0$.)