**STAT0008: Stochastic Processes**

# Lecture 7 - Reversibility and Time Reversals

Lecturer: Weichen Zhao | Spring 2025

**Key concepts**:

- 可逆分布；
- 细致平衡条件。

Markov性的一个等价表述是：在已知“现在”的条件下，“过去”和“未来”是独立的，这表明了“过去”和“未来”在时间上的对称性。本节讨论在时间上具有对称性的，即可逆Markov链。

此外，我们已经知道Markov链的长时间行为与不变分布紧密联系，但是直接通过不变方程求解不变分布是困难的，对于可逆Markov链，本节还会给出一个更容易计算不变分布的条件。

## 7.1 可逆Markov链

**Definition 7.1 (时间逆转)** 设$\{X_n\}$是一个*Markov*链，对任意固定时间$N$，$\{Y_n \triangleq X_{N-n} : 0 \leqslant n \leqslant N\}$称为$\{X_n\}$的时间逆转过程*(Time Reversal).*

**Proposition 7.2** 时间逆转过程$\{Y_n, 0 \leqslant n \leqslant N\}$是一个*Markov*链，其一步转移概率为

$$\tilde{P}_{ij} \triangleq P(Y_{n+1} = j | Y_n = i) = \frac{\mu_j^{(N-n-1)}}{\mu_i^{(N-n)}} P_{ji},$$

其中$\mu^{(n)}$是$X_n$的分布。特别地，如果$\{X_n\}$初分布是不变分布，记为$\pi$，则$\{Y_n\}$是时齐的，一步转移概率为

$$\tilde{P}_{ij} = \frac{\pi_j}{\pi_i} P_{ji}.$$

**Proof:** 对任意$n$，状态$i_{N-n}, i_{N-n+1}, \ldots, i_N$，

$$
\begin{aligned}
& P(Y_n = i_{N-n} | Y_{n-1} = i_{N-n+1}, \cdots, Y_0 = i_N) \\
& = P(X_{N-n} = i_{N-n} | X_{N-n+1} = i_{N-n+1}, \cdots, X_N = i_N) \\
& = \frac{P(X_{N-n} = i_{N-n}, X_{N-n+1} = i_{N-n+1}, \cdots, X_N = i_N)}{P(X_{N-n+1} = i_{N-n+1}, \cdots, X_N = i_N)} \\
& = \frac{P(X_{N-n} = i_{N-n}) P_{i_{N-n}, i_{N-n+1}} P_{i_{N-n+1}, i_{N-n+2}} \cdots P_{i_{N-1}, i_N}}{P(X_{N-n+1} = i_{N-n+1}) P_{i_{N-n+1}, i_{N-n+2}} \cdots P_{i_{N-1}, i_N}} \\
& = \frac{P(X_{N-n} = i_{N-n}) P_{i_{N-n}, i_{N-n+1}}}{P(X_{N-n+1} = i_{N-n+1})} \qquad (*) \\
& = P(X_{N-n} = i_{N-n} | X_{N-n+1} = i_{N-n+1}) \\
& = P(Y_n = i_{N-n} | Y_{N-1} = i_{N-n+1})
\end{aligned}
$$

所以$\{Y_n\}$是一个Markov链，从推导中的(*)式可以看出一步转移概率为

$$\tilde{P}_{ij} \triangleq P(Y_{n+1} = j | Y_n = i) = \frac{\mu_j^{(N-n-1)}}{\mu_i^{(N-n)}} P_{ji}.$$

■

下面我们定义一类性质良好的Markov链，它的时间逆转链的转移矩阵依然是$P$。

**Definition 7.3 (可逆Markov链)** *设$\pi$为$E$上的一个概率分布，$P$为不可约Markov链$\{X_n\}$的转移矩阵，如果$P$满足*

$$\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}, \quad \forall i, j \in E \tag{7.1}$$

*则称Markov链$\{X_n\}$是可逆的 (reversible)。(7.1)式称为细致平衡条件(detailed balance)，分布$\pi$称为$P$的一个可逆分布(reversible distribution)。*

**注1.** 一般的如果$E$上测度$\nu$满足细致平衡(7.1)，则称$\nu$为$P$的一个配称测度(Symmetric Measure)，称$P$是可配称的。

**注2.** 对于可逆Markov链$\{X_n\}$，对任意$k$都有：$(X_k, X_{k-1}, \ldots, X_0)$和$(X_0, X_1, \ldots, X_k)$同分布。

**注3.** 对于有限状态空间上的可逆Markov链，转移矩阵$P$的所有特征值为实数。

证明只需要考虑实对称矩阵

$$Q_{ij} \triangleq \frac{\sqrt{\pi_i}}{\sqrt{\pi_j}} P_{ij}$$

那么$Q$的所有特征值为实数，那么

$$P = diag(\sqrt{\pi_1}, \ldots, \sqrt{\pi_n})^{-1} Q \; diag(\sqrt{\pi_1}, \ldots, \sqrt{\pi_n})$$

的所有特征值为实数。

**Proposition 7.4** 可逆分布是不变分布。

**Proof:** 由细致平衡条件

$$\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}, \quad \forall i, j \in E$$

对$j$求和有

$$\sum_j \pi_i P_{ij} = \sum_j \pi_j P_{ji}, \quad \forall i \in E$$

由于$\sum_j P_{ij} = 1$，所以

$$\pi_i = \sum_j \pi_j P_{ji}, \quad \forall i \in E$$

即$\pi$为不变分布。 ■

**注1.** 该命题的逆命题不一定成立，给一个简单的反例：

考虑状态空间为$\{1, 2, 3\}$的Markov链，转移矩阵为

$$P = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

该链具有不变分布 $\pi = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right)$，然而

$$\pi_1 P_{12} - \pi_2 P_{21} = \frac{1}{6} \neq 0$$

所以该链的不变分布不是可逆分布。

**注2.** 可逆分布一个良好的性质是它限制在状态空间$E$的子集$A \in E$上依然是可逆分布。令矩阵$\hat{P}$为

$$\hat{P}_{ij} \triangleq \begin{cases} P_{ij}, & \forall j \in A, j \neq i, \\ P_{ii} + \sum\limits_{j \notin A} P_{ij}. & \end{cases}$$

则$\hat{P}$是$A$上的转移矩阵。若$\pi$是$P$的可逆分布，则$\hat{P}$的可逆分布为 $\pi|_A$。但是，$P$的不变分布$\mu$却未必能保证 $\mu|_A$是$\hat{P}$的不变测度。

**注3.** 可逆分布另一个好处是容易计算，看一个简单的例子

**Example 7.5 (有限图上的随机游走)** 设$\{X_n\}$是连通图$\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$上的随机游走，其中$|\mathcal{V}| < \infty$。记节点$i$的度为$d_i$，令$\mu_i = d_i$，那么

$$\mu_i p_{ij} = \mu_j p_{ji} = \begin{cases} 1, & \text{若 } i, j \text{ 是邻居}, \\ 0, & \text{否则}. \end{cases}$$

因此细致平衡条件成立，即$\mu$是配称测度，又$|\mathcal{V}| < \infty$，做归一化，令

$$\pi \triangleq \frac{d_i}{\sum_j d_j}$$

则$\pi$是可逆分布，自然$\pi$也是不变分布。

## 7.2 Metropolis 链

给定一个不可约转移矩阵$P$，我们之前研究了它的不变分布的相关问题，现在我们考虑它的反问题：

给定状态空间$E$上的概率分布$\pi$，如何构造转移矩阵$P$，使得$P$的唯一平稳分布为$\pi$？

本节我们讨论一个重要的可逆Markov链——Metropolis 链，初步回答这个问题。

考虑有限状态空间$E = \{1, 2, \ldots, n\}$，设$\pi$为$E$上任意概率分布，令$Q$是其上的一个不可约对称转移矩阵，即$Q_{ij} = Q_{ji}$，那么由细致平衡条件

$$\nu_i Q_{ij} = \nu_j Q_{ji}$$

可知$E$上的均匀分布$\nu$为$Q$的可逆分布。我们现在考虑调整转移概率$Q_{ij}$，使它的不变分布从均匀分布调整到目标分布$\pi$. 定义

$$P_{ij} \triangleq \begin{cases} Q_{ij}a(i,j) & \text{if } j \neq i, \\ 1 - \sum_{k:k\neq i} Q_{ik}a(i,k) & \text{if } j = i. \end{cases}$$

其中$a(i,j)$为接受概率，即我们有$a(i,j)$的概率接受以$Q_{ij}$这个概率从状态$i$转移到$j$，有$1-a(i,j)$的概率从$i$转移到$j$概率为0.

我们希望通过调整接受概率$a(i,j)$来使得$P$的不变分布为目标分布$\pi$. 我们知道满足细致平衡条件

$$\pi_i Q_{ij} a(i,j) = \pi_j Q_{ji} a(j,i), \quad \forall i \neq j$$

的$P$一定以$\pi$为不变分布，由于$Q_{ij} = Q_{ji}$，所以只需要满足

$$\pi_i a(i,j) = \pi_j a(j,i), \quad \forall i \neq j$$

注意到$a(i,j) \leq 1$，那么

$$\pi_i a(i,j) \leq \pi_i, \quad \pi_i a(i,j) = \pi_j a(j,i) \leq \pi_j$$

即 $\pi_i a(i,j) \leq \min\{\pi_i, \pi_j\}$，我们希望接受概率高一些，不然构造的Markov链转移效率会十分低下，于是取

$$\pi_i a(i,j) = \min\{\pi_i, \pi_j\}$$

即接受概率

$$a(i,j) = \min\{1, \pi_j/\pi_i\}$$

至此，我们构造了一个以给定分布$\pi$为不变分布的Markov链，称为Metropolis 链。

**Definition 7.6 (Metropolis 链)** *对于一个概率分布$\pi$和对称转移矩阵$Q$，对应的Metropolis链定义为以*

$$P_{ij} \triangleq \begin{cases} Q_{ij} \min\{1, \pi_j/\pi_i\} & \text{if } j \neq i, \\ 1 - \sum_{k:k\neq i} Q_{ik} \min\{1, \pi_k/\pi_i\} & \text{if } j = i. \end{cases}$$

*为转移概率的Markov链。*

**注.** 给定目标分布$\pi$，我们可以通过Metropolis 链的转移得到$\pi$的样本，这种方法称为 Markov Chain Monte Carlo (MCMC) 方法。除了Metropolis 链，还有很多种方法可以构造MCMC，我们会在之后的课程中介绍。