

Key concepts:

- 可约性;
- 周期性;
- 常返性。

状态的性质会影响整个Markov链的性质，而链中状态的数目往往很大，研究每一个状态的性质比较繁琐，所以对Markov链的状态分类对研究Markov链是非常重要的。

5.1 可约性与周期性

本节从Markov链转移的代数性质出发(有些文献也称拓扑性质)，讨论可约性与周期性。先给出一些定义

Definition 5.1 (可达) 设 $i, j \in E$ 是 Markov 链中的两个状态，如果 $\exists n > 0$ ，使得

$$P_{ij}^{(n)} > 0$$

就称状态 i 可达 (*accessible*) 状态 j ，记作 $i \rightarrow j$ 。如果 i 不可达 j ，即 $\forall n > 0$ ， $P_{ij}^{(n)} = 0$ ，记为 $i \not\rightarrow j$ 。状态 i 可达 j 意味着可以在链中找到一条路径，起点是 i ，终点是 j 。我们约定 $P_{ii}^{(0)} = 1$ 。

注. 可达具有传递性，设 $i, j, k \in E$ ， $n, m > 0$ ，使得 $P_{ij}^{(n)} > 0$ ， $P_{jk}^{(m)} > 0$ ，则

$$P_{ik}^{(n+m)} = \sum_{j' \in E} P_{ij'}^{(n)} P_{j'k}^{(m)} \geq P_{ij}^{(n)} P_{jk}^{(m)} > 0$$

即若 $i \rightarrow j, j \rightarrow k$, 则 $i \rightarrow k$ 。

Definition 5.2 (互通) 设 $i, j \in E$ 是 Markov 链中的两个状态, 如果 $\exists n, m > 0$ 使得

$$P_{ij}^{(n)} > 0, \quad P_{ji}^{(m)} > 0$$

就称 i 和 j 互通 (communicate), 记作 $i \leftrightarrow j$ 。即, 如果 i 可达 j , j 又可达 i , 那么 i 和 j 就是互通的。

Proposition 5.3 互通是状态集合 E 上的一个等价关系, 即满足:

1. 自反性: $i \leftrightarrow i$;
2. 对称性: 若 $i \leftrightarrow j$, 则 $j \leftrightarrow i$;
3. 传递性: 若 $i \leftrightarrow j, j \leftrightarrow k$, 则 $i \leftrightarrow k$

因此所有互通的状态构成等价类, 被称为互通类 (communicating class)。

Definition 5.4 (不可约性) 一个 Markov 链称为不可约的 (irreducible), 如果它的互通类只有一个 (状态集合本身), 即所有状态都是互通的。

注. 这不是我们第一次接触可约性, 回顾矩阵的可约性:

设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是一个 n 阶方阵, 称 A 可约 (reducible), 如果存在一个置换矩阵 P , 使得 $P^T A P$ 可以写成如下上三角分块形式:

$$P^T A P = \begin{bmatrix} B & C \\ 0 & D \end{bmatrix}$$

其中 B 是 $k \times k$ 的方阵, D 是 $(n - k) \times (n - k)$ 的方阵, 0 是零矩阵, C 是一般矩阵, $1 \leq k < n$, 即 B 和 D 不是退化的。如果矩阵 A 不能被写成上述形式, 则称其为不可约的。一个 Markov 链不可约, 当且仅当, 它的转移矩阵不可约。

下面讨论状态的周期性。

Definition 5.5 (周期性) 状态 $i \in E$ 的周期 (*period*) 定义为

$$d_i \triangleq \gcd\{n : P_{ii}^{(n)} > 0\}$$

即集合 $\{n : P_{ii}^{(n)} > 0\}$ 的最大公约数。若 $d_i = 1$, 则称状态 i 是非周期的 (*aperiodic*)。

Proposition 5.6 若 $i \leftrightarrow j$, 则 $d_i = d_j$.

Proof: 由于 $i \leftrightarrow j$, 故存在 m, n , 使得

$$P_{ij}^{(m)} > 0, \quad P_{ji}^{(n)} > 0$$

又 d_j 为状态 j 的周期, 所以存在 k ,

$$P_{jj}^{(kd_j)} > 0, \quad P_{jj}^{((k+1)d_j)} > 0$$

那么

$$\begin{aligned} P_{ii}^{(m+kd_j+n)} &\geq P_{ij}^{(m)} P_{jj}^{(kd_j)} P_{ji}^{(n)} > 0 \\ P_{ii}^{(m+(k+1)d_j+n)} &\geq P_{ij}^{(m)} P_{jj}^{((k+1)d_j)} P_{ji}^{(n)} > 0 \end{aligned}$$

即

$$d_i \mid (m + kd_j + n), \quad \text{且} \quad d_i \mid (m + (k+1)d_j + n)$$

故 $d_i \mid d_j$ 。同理可证 $d_j \mid d_i$, 故 $d_i = d_j$. ■

利用周期性, 可以在一个互通类中进一步对状态进行分类, 下面不妨考虑不可约 Markov 链。

由于不可约, 由命题 5.6, 每个状态的周期相同, 记为 d 。给定某个状态 i_0 , 我们定义下面集合

$$\begin{aligned} C_0 &= \{j \in E, P_{i_0j}^{(n)} > 0, n \equiv 0(\text{mod } d)\} \\ C_1 &= \{j \in E, P_{i_0j}^{(n)} > 0, n \equiv 1(\text{mod } d)\} \\ &\vdots \\ C_{d-1} &= \{j \in E, P_{i_0j}^{(n)} > 0, n \equiv d-1(\text{mod } d)\} \end{aligned}$$

那么状态集合 E 可以分解为 $E = C_0 \cup C_1 \cup \cdots \cup C_{d-1}$ 。

Proposition 5.7 若状态 $i \in C_p$, 且 $P_{ij} > 0$, 那么 $j \in C_{p+1}$

Proof: 由于 $i \in C_p$, 则存在 $a = kd + p$, 其中 k 为某个自然数, 使得

$$P_{i_0 i}^{(a)} > 0$$

对于 $a + 1 = kd + p + 1$

$$P_{i_0 j}^{(a+1)} \geq P_{i_0 i}^{(a)} P_{ij} > 0$$

即 $j \in C_{p+1}$. ■

这说明不可约周期Markov链的转移具有规律: 当 $0 \leq k \leq d - 1$ 时, 从 C_k 中的状态转移到 C_{k+1} , 然后从 C_{d-1} 转移回到 C_0 , 即经过适当的行列置换后, 它的转移矩阵可以表示为

$$P = \begin{pmatrix} 0 & A_{0,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & A_{1,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & A_{d-2,d-1} \\ A_{d-1,0} & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

其中 $A_{k,k+1}$ 表示从 C_k 中的状态转移到 C_{k+1} 的转移概率矩阵。

5.2 常返性

本节从讨论状态在Markov链转移过程中的渐近特性出发, 讨论常返性, 先给出一些定义。

Definition 5.8 (首次时) 设 $\{X_n\}$ 为一个状态空间为 E 的Markov链, 从 $n = 0$ 出发首次达到状态 $j \in E$ 的时刻定义为

$$\tau_j \triangleq \inf\{n \geq 1 : X_n = j\}$$

若 $\{n \geq 1 : X_n = j\}$ 为空集, 则 $\tau_j \triangleq \infty$.

Definition 5.9 (首次概率) 设 $\{X_n\}$ 为一个状态空间为 E 的Markov链, 则经过 n 步从状态 i 到 j 的首达概率定义为

$$\begin{aligned} f_{ij}^{(n)} &\triangleq P(\tau_j = n | X_0 = i) \\ &= P(X_n = j, X_{n-1} \neq j, \cdots, X_1 \neq j | X_0 = i) \end{aligned}$$

注. 定义事件

$$A_n \triangleq \{X_n = j, X_{n-1} \neq j, \dots, X_1 \neq j | X_0 = i\}$$

则 $\{A_n\}$ 互不相容, 即

$$A_n \cap A_m = \phi, \quad n \neq m$$

那么从状态 i 出发迟早到达状态 j 的概率为

$$f_{ij} \triangleq P(\tau_j < \infty | X_0 = i) = P\left(\bigcup_{k=1}^{\infty} A_k | X_0 = i\right) = \sum_{n=1}^{\infty} f_{ij}^{(n)} \leq 1$$

下面定义常返性

Definition 5.10 (常返性)

如果

$$f_{ii} = \sum_{n=1}^{\infty} f_{ii}^{(n)} = 1$$

则称状态 i 是常返的(*Recurrent*), 否则称 i 为暂留的(*Transient*), 或者非常返的(*Nonrecurrent*)。

虽然我们通过 f_{ij} 来定义常返性, 但 $f_{ij}^{(n)}$ 的计算并不容易, 所以我们想要通过 n 步转移概率 $P_{ij}^{(n)}$ 来计算, 通过 $P_{ij}^{(n)}$ 来获得状态是否是常返的判据, 这即是下面的定理:

Theorem 5.11 状态 i 是常返态的充分必要条件是

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_{ii}^{(n)} = \infty$$

Proof: 注意到事件

$$A_n \triangleq \{X_n = j, X_{n-1} \neq j, \dots, X_1 \neq j | X_0 = i\}$$

互不相容，考虑基于此对样本轨道进行分解

$$\begin{aligned}
 P_{ij}^{(n)} &= P(X_n = j | X_0 = i) \\
 &= \sum_{k=1}^n P(X_n = j, X_k = j, X_{k-1} \neq j, \dots, X_1 \neq j | X_0 = i) \\
 &= \sum_{k=1}^n P(X_n = j | X_k = j, X_{k-1} \neq j, \dots, X_1 \neq j, X_0 = i) P(X_k = j, X_{k-1} \neq j, \dots, X_1 \neq j | X_0 = i) \\
 &= \sum_{k=1}^n P(X_n = j | X_k = j) P(X_k = j, X_{k-1} \neq j, \dots, X_1 \neq j | X_0 = i) \\
 &= \sum_{k=1}^n f_{ij}^{(k)} P_{jj}^{(n-k)}
 \end{aligned}$$

想要计算 $\sum_{n=0}^{\infty} P_{ii}^{(n)}$ ，考虑用Abel定理。

$$\begin{aligned}
 \sum_{n=0}^{\infty} P_{ij}^{(n)} z^n &= \delta_{ij} + \sum_{n=1}^{\infty} P_{ij}^{(n)} z^n \\
 &= \delta_{ij} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^n f_{ij}^{(k)} P_{jj}^{(n-k)} z^n \\
 &= \delta_{ij} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^n (f_{ij}^{(k)} z^k) (P_{jj}^{(n-k)} z^{n-k}) \\
 &= \delta_{ij} + \sum_{k=1}^{\infty} (f_{ij}^{(k)} z^k) \sum_{n=k}^{\infty} (P_{jj}^{(n-k)} z^{n-k}) \\
 &= \delta_{ij} + \sum_{k=1}^{\infty} (f_{ij}^{(k)} z^k) \sum_{m=0}^{\infty} (P_{jj}^{(m)} z^m)
 \end{aligned}$$

那么

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_{ii}^{(n)} z^n = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} (f_{ii}^{(k)} z^k) \sum_{n=0}^{\infty} (P_{ii}^{(n)} z^n)$$

即

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_{ii}^{(n)} z^n = \frac{1}{1 - \sum_{k=1}^{\infty} f_{ii}^{(k)} z^k}$$

令 $z \rightarrow 1^-$ ，由Abel定理可得

$$\sum_{n=1}^{\infty} P_{ii}^{(n)} = \frac{1}{1 - f_{ii}}$$

那么 $f_{ii} = 1$ 即等价于 $\sum_{n=0}^{\infty} P_{ii}^{(n)} = \infty$ ■

注1. 另一种概率方法的证明:

由 f_{ii} 的定义, Markov链 $\{X_n\}$ 从状态 i 出发, 最终能回到 i 的概率为 f_{ii} , 那么一直回不到 i 的概率为 $1 - f_{ii}$.

由于Markov性, 所以在回到 i 之后, 过程在概率意义下又重新开始, 那么 $X_0 = i$ 开始, Markov链 $\{X_n\}$ 恰有 n 次处于状态 i 服从几何分布,

$$P\{X_n \text{ 处于状态 } i \text{ 的次数} = n \mid X_0 = i\} = f_{ii}^{n-1}(1 - f_{ii})$$

所以, 从 i 出发以后, 处于 i 次数的期望为

$$\sum_{n=1}^{\infty} n f_{ii}^{n-1} (1 - f_{ii}) = \frac{1}{1 - f_{ii}}$$

那么 i 是常返态, 当且仅当

$$\mathbb{E}[X_n \text{ 处于状态 } i \text{ 的次数} \mid X_0 = i] = \infty$$

记随机序列 I_n 为: 当 $X_n = i$ 时 $I_n = 1$, 否则为0, 那么 $\sum_{n=0}^{\infty} I_n$ 表示处于状态 i 的次数, 则有

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\sum_{n=1}^{\infty} I_n \mid X_0 = i \right] &= \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{E}[I_n \mid X_0 = i] \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} P(X_n = i \mid X_0 = i) = \sum_{n=1}^{\infty} P_{ii}^{(n)} \end{aligned}$$

故状态 i 是常返态的充分必要条件是 $\sum_{n=0}^{\infty} P_{ii}^{(n)} = \infty$.

注2. 从注1的证明过程中, 我们可以看出若状态 i 是暂留的, 则Markov链只会有限次处于状态 i , 可以具体表述为下面推论。

Corollary 5.12 如果状态 j 是暂留的, 那么对任意状态 i ,

$$P_{ij}^{(n)} \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty$$

Proof: 若 $j = i$ 是暂留的, 我们已经证明:

$$\sum_{n=1}^{\infty} P_{ii}^{(n)} = \frac{1}{1 - f_{ii}} < \infty$$

所以级数的通项 $\lim_{n \rightarrow \infty} P_{ij}^{(n)} = 0$.

另一方面, 若 $j \neq i$ 是暂留的, 我们已经证明:

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_{ij}^{(n)} = \delta_{ij} + \sum_{k=1}^{\infty} f_{ij}^{(k)} \sum_{n=0}^{\infty} P_{jj}^{(n)} = \sum_{n=1}^{\infty} f_{ij}^{(n)} \sum_{n=0}^{\infty} P_{jj}^{(n)} < \infty$$

所以级数的通项 $\lim_{n \rightarrow \infty} P_{ij}^{(n)} = 0$. ■

注3. 常返与非常返具有类的性质。

Corollary 5.13 若状态 i 是常返的, 且 $i \leftrightarrow j$, 则 j 是常返的。

Proof: 由于 $i \leftrightarrow j$, 则存在 m 和 n 使得

$$P_{ij}^{(n)} > 0, \quad P_{ji}^{(m)} > 0$$

对任意 $s > 0$, 由CK方程有

$$P_{jj}^{(m+n+s)} \geq P_{ji}^{(m)} P_{ii}^{(s)} P_{ij}^{(n)}$$

由于状态 i 是常返的, 即 $\sum_{s=0}^{\infty} P_{ii}^{(s)} = \infty$, 所以

$$\sum_{s=0}^{\infty} P_{jj}^{(m+n+s)} \geq P_{ji}^{(m)} P_{ij}^{(n)} \sum_{s=0}^{\infty} P_{ii}^{(s)} = \infty$$

由定理5.11, j 是常返的。 ■

上面的推论表明常返与非常返是互通类的性质, 因此我们可以说一个状态的集合为一个常返类或非常返类。如果Markov链不可约, 则所有状态或者都常返, 或者都非常返。此时, 我们也可说Markov链是常返的或非常返的。

注4. 有的文献也称 $\sum_{n=0}^{\infty} P_{ij}^{(n)}$ 为格林函数, 记为 G_{ij} .

如果Markov链的状态是有限的, 常返性的判定会更加简化, 有下面结论:

Proposition 5.14 有限状态Markov链必然存在常返态。

Proof: 反证法，若命题不成立。设状态空间 $E = \{1, 2, \dots, N\}$ ，则所有状态都是暂留的。固定状态 i ，对任意 j ，由推论5.12

$$P_{ij}^{(k)} \rightarrow 0, \quad k \rightarrow \infty$$

所以

$$\sum_{j=1}^N P_{ij}^{(k)} \rightarrow 0, \quad k \rightarrow \infty$$

但是由转移概率的性质，对任意 k 有

$$\sum_{j=1}^N P_{ij}^{(k)} = 1$$

矛盾! ■

注. 结合推论5.13，我们知道：对于状态有限不可约Markov链，所有状态都是常返态。

Example 5.15 (d 维简单随机游走的常返性) 设 ξ_1, ξ_2, \dots 是取值于 $E = \mathbb{Z}^d$ 独立同分布随机向量，满足

$$P(\xi_1 = e_i) = P(\xi_1 = -e_i) = \frac{1}{2d}, \quad i = 1, \dots, d$$

其中 e_i 是第 i 个坐标为1，其余为0的方向向量。

设 S_0 独立于 ξ_1, ξ_2, \dots ，令

$$S_n := S_0 + \xi_1 + \dots + \xi_n = S_{n-1} + \xi_n.$$

则 S_n 为从 S_0 出发的 d 维简单随机游走。

当 $d = 1, 2$ 时， S_n 是常返的，当 $d \geq 3$ 时， S_n 是非常返的。

Proof: 不妨假设 $S_0 = 0$ ，由 ξ_i 的定义，所有状态都是互通的，即 S_n 不可约，所以所有状态的常返性一致，因此我们只考虑0状态的常返性。

容易注意到经过奇数步不可能回到状态0, 若经过 $2n$ 步回到0, 那么对任意方向 $i \in \{1, \dots, d\}$, 必须在该方向前进和后退相同的步数, 记为 n_i , 于是

$$P_{00}^{(2n)} = \sum_{n_1 + \dots + n_d = n} \frac{(2n)!}{(n_1!)^2 \cdots (n_d!)^2} \frac{1}{(2d)^{2n}}.$$

$d = 1$ 时

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_{00}^{(2n)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n)!}{(n!)^2} \frac{1}{2^{2n}}.$$

由Stirling公式 $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n!}{\sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n} = 1$, 对任意的 $\epsilon > 0$, 存在 n_0 , 当 $n > n_0$ 时,

$$(1 - \epsilon) \frac{1}{\sqrt{\pi n}} \leq \frac{(2n)!}{(n!)^2} \frac{1}{2^{2n}} \leq (1 + \epsilon) \frac{1}{\sqrt{\pi n}}.$$

所以 $\sum_{n=0}^{\infty} P_{00}^{(2n)} = \infty$, 即 S_n 常返。

$d = 2$ 时

$$\begin{aligned} P_{00}^{(2n)} &= \sum_{n_1 + n_2 = n} \frac{(2n)!}{(n_1!)^2 (n_2!)^2} \cdot \frac{1}{4^{2n}} \\ &= \frac{(2n)!}{n! n!} \cdot \frac{1}{4^{2n}} \sum_{n_1 + n_2 = n} \frac{n!}{n_1! n_2!} \cdot \frac{n!}{n_2! n_1!} \\ &= C_{2n}^n \cdot \frac{1}{4^{2n}} \sum_{n_1=0}^n C_n^{n_1} C_n^{n-n_1} \\ &= C_{2n}^n \cdot \frac{1}{4^{2n}} \cdot C_{2n}^n = \left(C_{2n}^n \frac{1}{2^{2n}} \right)^2 \\ &\approx \frac{1}{\pi n} \end{aligned}$$

所以 $\sum_{n=0}^{\infty} P_{00}^{(2n)} = \infty$, 即 S_n 常返。

当 $d \geq 3$ 时, 可以证明, 当 n 充分大时, 有

$$P_{00}^{(2n)} \leq C_d \cdot n^{-d/2},$$

其中 C_d 是依赖于 d 的常数。(参考《应用随机过程》, 陈大岳、章复熹, 北京大学出版社, 2023, P95-P99)

所以 $\sum_{n=0}^{\infty} P_{00}^{(2n)} < \infty$, 即 S_n 非常返。 ■

注. 这表明一维或二维的简单随机游动一定能回到起点, 但三维以上的简单随机游动却不一定。日本学者角谷静夫在加利福尼亚大学洛杉矶分校 (UCLA) 演讲时对此给出了一个有趣的注解: “A drunk man will find his way home, but a drunk bird may get lost forever.”