Комментарии к теме «*Марковские цепи с дискретным пространством состояний*»

Практические занятия по теории вероятностей

кафедра статистического моделирования `http://statmod.ru`, матмех СПбГУ, 2017 г.

1 Определение

Пусть $X = \{x_1, x_2, \ldots, x_k, \ldots\}$ — конечное или счетное множество. Рассмотрим (снова конечную или счетную) последовательность случайных величин $\xi_0, \xi_1, \ldots, \xi_n, \ldots$ каждая из которых принимает значения в множестве X.[1]

Как обычно, когда мы имеем дело с распределениями дискретных случайных величин, природа элементов x_k множества X не имеет значения (это могут быть числа, вектора, картинки и пр.). Поэтому для удобства записи мы будем отождествлять x_k с числом k.[2]

Определение 1.1. Последовательность $\xi_0, \xi_1, \ldots, \xi_n, \ldots$ называется *марковской цепью*,[3] если существуют такие неотрицательные числа π_i, в сумме дающие 1, и такие матрицы $\mathbb{P}_k$ $(k \geq 1)$ с неотрицательными элементами $p_{ij}^{(k)}$, удовлетворяющие равенствам $\sum_j p_{ij}^{(k)} = 1$ для любого i, что для любого $n \geq 0$ и любых $i_1, \ldots, i_n$ выполняется равенство

$$\mathrm{P}\big(\xi_0 = i_0, \xi_1 = i_1, \ldots, \xi_{n-1} = i_{n-1}, \xi_n = i_n\big) = \pi_{i_0} p_{i_0 i_1}^{(1)} p_{i_1 i_2}^{(2)} \ldots p_{i_{n-1} i_n}^{(n)}. \tag{1.1}$$

Взяв $m = 0$ мы придем к равенству $\mathrm{P}\big(\xi_0 = i\big) = \pi_i$. Поэтому вектор-строка $\pi = (\pi_1, \ldots, \pi_m, \ldots)$ будет называться *начальным распределением* марковской цепи.[4]

Множество X называют *пространством состояний* марковской цепи. Если это множество конечно, то говорят о *конечной* марковской цепи.

Если все матрицы $\mathbb{P}_n$ являются одинаковыми, то марковская цепь называется *однородной*.[5] В этом случае для этих матриц используется обозначение $\mathbb{P}$, а для их элементов — p_{ij}, так что (1.1) превращается в

$$\mathrm{P}\big(\xi_0 = i_0, \xi_1 = i_1, \ldots, \xi_{n-1} = i_{n-1}, \xi_n = i_n\big) = \pi_{i_0} p_{i_0 i_1} p_{i_1 i_2} \ldots p_{i_{n-1} i_n}. \tag{1.2}$$

Матрица $\mathbb{P}$ называется *переходной матрицей* (однородной) марковской цепи.[6]

Приведенное определение содержит две дискретные составляющие: дискретным является как время, так и пространство состояний. Дискретность времени обозначается словом «цепь», иначе говорят о *марковском процессе*. В случае, если пространство состояний дискретно, а время непрерывно, употребляют термины *марковский процесс с дискретным пространством состояний* или (иногда) *марковская цепь с непрерывным временем*.

Сделаем сразу несколько замечаний.

[1] С формальной точки зрения этих случайных величин должно быть не меньше двух. Мы простоты мы будем считать эту последовательность бесконечной.

[2] В конкретных ситуациях это отождествление, естественно, может не производиться.

[3] Иначе — *обладает марковским свойством* или *является цепью Маркова*.

[4] Именно вектор-строка, а не вектор-столбец!

[5] Если — «нет», то *неоднородной*.

[6] Выведите из (1.2), что в однородном случае $\mathcal{L}(\xi_n) = \pi\mathbb{P}^n$. А как записать аналогичное выражение для неоднородной марковской цепи?

Замечание 1.1. 1. Удобная и наглядная интерпретация марковских цепей — это описание последовательных положений некой движущейся частицы: в начальный момент времени она имеет «координату» i_0, в следующий момент времени — i_1 и так далее. В этих терминах (1.1) показывает, с какой вероятностью траектория частицы за n шагов будет $(i_0, \ldots, i_n)$.[7] На этом «физическом» языке множество X называют *фазовым пространством* марковской цепи, а вероятность $p_{ij}^{(k)}$ имеет смысл вероятности перехода частицы из состояния i в состояние j в момент времени k.[8]

2. Если бы случайные величины ξ_i были независимы, то (1.1) превратилось бы в

$$\mathrm{P}\big(\xi_0 = i_0, \xi_1 = i_1, \ldots, \xi_{n-1} = i_{n-1}, \xi_n = i_n\big) = \pi_{i_0} p_{i_1}^{(1)} p_{i_2}^{(2)} \ldots p_{i_n}^{(n)},$$

где $p_j^{(n)} = \mathrm{P}\big(\xi_n = j\big)$. Наличие двух индексов у чисел $p_{ij}^{(k)}$ свидетельствует о том, что случайные величины ξ_i, вообще говоря, зависимы. Одновременно мы видим, что независимые случайные величины образуют марковскую цепь: в этом случае строки у каждой из матриц $\mathbb{P}_n$ одинаковы.

3. Пусть событие $A_{i_0 \ldots i_n} = \big\{\xi_0 = i_0, \xi_1 = i_1, \ldots, \xi_{n-1} = i_{n-1}\big\}$ имеет ненулевую вероятность. Тогда из (1.1) сразу же следует, что

$$\mathrm{P}\big(\xi_n = i_n \,|\, \xi_0 = i_0, \xi_1 = i_1, \ldots, \xi_{n-1} = i_{n-1}\big) = p_{i_{n-1} i_n}^{(n)}. \tag{1.3}$$

Отсюда видно, какой характер имеет зависимость случайных величин, составляющих марковскую цепь. Если известна траектория $i_0, i_1, \ldots . i_{n-1}$ частицы до времени $n-1$ включительно, то распределение ее (случайного) положения на следующем шаге определяется только ее последней координатой i_{n-1}. Иными словами, частица «забывает» про то, как она попала в i_{n-1}, ее последующее движение от этого не зависит. В определении это свойство отражено словом «цепь».[9]

4. Нетрудно видеть, что равенство (1.3) может быть переписано[10] в виде

$$\mathrm{P}\big(\xi_n = i_n \,|\, \xi_0 = i_0, \xi_1 = i_1, \ldots, \xi_{n-1} = i_{n-1}\big) = \mathrm{P}\big(\xi_n = i_n \,|\, \xi_{n-1} = i_{n-1}\big). \tag{1.4}$$

Действительно,

$$\mathrm{P}\big(\xi_{n-1} = i_{n-1}, \xi_n = i_n\big) = \left(\sum_{(i_0, \ldots, i_{n-2})} \pi_{i_0} p_{i_0 i_1}^{(1)} p_{i_1 i_2}^{(2)} \ldots p_{i_{n-2} i_{n-1}}^{(n-1)} \right) p_{i_{n-1} i_n}^{(n)},$$

а

$$\mathrm{P}\big(\xi_{n-1} = i_{n-1}\big) = \sum_{(i_0, \ldots, i_{n-2})} \mathrm{P}\big(\xi_0 = i_0, \xi_1 = i_1, \ldots, \xi_{n-1} = i_{n-1}\big) = \sum_{(i_0, \ldots, i_{n-2})} \pi_{i_0} p_{i_0 i_1}^{(1)} p_{i_1 i_2}^{(2)} \ldots p_{i_{n-2} i_{n-1}}^{(n-1)},$$

откуда сразу же следует (1.4).

Исторически именно равенство (1.4) считается определением марковской цепи. При этом числа $p_{i_{n-1} i_n}^{(n)}$ определяются через равенства (1.3) (точнее, как $p_{i_{n-1} i_n}^{(n)} \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{P}\big(\xi_n = i_n \,|\, \xi_{n-1} = i_{n-1}\big)$).

Такой путь более нагляден, чем наше определение (1.1), и лучше соответствует «физическому» пониманию сути дела. Однако, тут есть логические ловушки, которыми обычно считают несущественными. Например, что такое $p_{ij}^{(2)}$, если $\mathrm{P}(\xi_1 = i) = 0$?

При решении упражнений, однако, эти ловушки действительно не имеют значения и равенства (1.1), (1.3) и (1.4) могут в равной степени использоваться для проверки марковости той или иной последовательности случайных величин.[11]

---

[7] С чисто вероятностной точки зрения (1.1) задает совместное распределение случайных величин $\xi_1, \ldots, \xi_n$.

[8] или — на k-м шаге.

[9] Аналогичным свойством, как известно, обладают дифференциальные уравнения. Действительно, пусть $0 < t_1 < t$. Тогда решение $x(t)$ обыкновенного дифференциального уравнения в момент времени t с начальными данными x в нулевой момент времени совпадает с решением того же уравнения с начальными данными $x(t_1)$, взятыми в момент времени t_1.

[10] при том же условии $\mathrm{P}\big(A_{i_0 \ldots i_n}\big) > 0$.

[11] Определение (1.1) в большей степени соответствует изложению в учебнике А. Ширяева (Вероятность-1, гл. 1 §12), где подробно рассматриваются всевозможные эффекты нулевой вероятности.

Приведем пример конструкции, которая автоматически приводит к марковскому свойству. Рассмотрим последовательность $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \ldots$ независимых случайных величин, принимающих значения в некотором измеримом пространстве $(D, \mathcal{D})$. Кроме того, введем следующие функции.[12]

Пусть $f_0 : D \mapsto X$, а при $k \geq 1$ возьмем $f_k : X \times D \mapsto X$. Теперь положим $\xi_0 = f_0(\varepsilon_0)$, $\xi_k = f_k(\xi_{k-1}, \varepsilon_k)$ при $k \geq 1$ и докажем, что полученная последовательность является марковской.

Действительно,

$$\mathrm{P}\big(\xi_0 = i_0, \xi_1 = i_1, \ldots, \xi_n = i_n\big) = \mathrm{P}\big(f_0(\varepsilon_0) = i_0, f_1(\xi_0, \varepsilon_1) = i_1, \ldots, \xi_n = f_n(\xi_{n-1}, \varepsilon_n) = i_n\big) =$$
$$= \mathrm{P}\big(f_0(\varepsilon_0) = i_0, f_1(i_0, \varepsilon_1) = i_1, \ldots, f_n(i_{n-1}, \varepsilon_n) = i_n\big) = \mathrm{P}\big(f_0(\varepsilon_0) = i_0\big) \prod_{k=1}^{n} \mathrm{P}\big(f_k(i_{k-1}, \varepsilon_k) = i_k\big),$$

так что (1.1) выполнено с $\pi_i = \mathrm{P}\big(f_0(\varepsilon_0) = i\big)$ и $p_{ij}^{(k)} = \mathrm{P}\big(f_k(i, \varepsilon_k) = j\big)$.

Приведенная конструкция еще раз демонстрирует суть марковского свойства: по определению ξ_k определяется лишь значением ξ_{k-1} и случайными явлениями (то есть случайными величинами ε_k, которые являются независимыми при различных k).[13]

2 Классификация состояний однородной марковской цепи

Далее мы будем рассматривать только однородные марковские цепи, имеющие начальное распределение π и переходную матрицу $\mathbb{P}$ с элементами p_{ij}, которые равны $\mathrm{P}(\xi_{k+1} = j \mid \xi_k = i)$.[14]

Элементы матрицы $\mathbb{P}^n$ будут обозначаться $p_{ij}(n)$, так что $p_{ij}(1) = p_{ij}$. Нетрудно показать,[15] что для любого k

$$p_{ij}(n) = \mathrm{P}(\xi_{n+k} = j \mid \xi_k = i),$$

то есть $p_{ij}(n)$ имеет смысл достичь состояния j из состояния i за n шагов. Кроме того, $\sum_j p_{ij}(n) = 1$.

При разных n числа $p_{ij}(n)$ связаны между собой *равенством Чепмена-Колмогорова*. А именно, для любого $1 < m < n$

$$p_{ij}(n) = \sum_k p_{ik}(n-m) p_{kj}(m), \tag{2.1}$$

которое в матричной форме превращается в очевидное $\mathbb{P}^n = \mathbb{P}^{n-m}\,\mathbb{P}^m$.

2.1 Основные определения

Если у нас есть некоторая матрица $\mathbb{P}$, все элементы которой неотрицательны, а сумма чисел в каждой строке равна 1, то такую матрицу называют *переходной*,[16] не привязывая ее к какой-то марковской цепи.

Используя конструкцию предыдущего раздела, можно доказать,[17] что для любого распределения π и любой переходной матрицы $\mathbb{P}$ существует марковская цепь, для которой выполняются равенства (1.2). Тем самым мы можем говорить о семействе марковских цепей с одной и той же переходной матрицей и различными начальными распределениями и изучать свойства этого семейства, а не отдельной марковской цепи.

[12] Все они предполагаются измеримыми.

[13] Какие условия нужно наложить на случайные величины ε_k и функции f_k, чтобы полученная марковская цепь была однородной?

[14] Однородность марковской цепи как раз и означает, что эти условные вероятности не зависят от k.

[15] Сделайте это!

[16] или *стохастической*

[17] А как?

Классификация состояний однородной марковской цепи использует только свойства переходной матрицы $\mathbb{P}$ (точнее, ее степеней) и не зависит от начального распределения $\mathcal{L}(\xi_0) = \pi$. Приведем соответствующие определения и утверждения.[18]

Определение 2.1. 1. Состояние j называется *достижимым* из состояния i, если $p_{ij}(n) > 0$ для некоторого $n \geq 1$.[19] Этот факт можно записывать в виде $i \to j$.[20]

2. Состояние i и j называются *сообщающимися*, если $i \to j$ и $j \to i$, то есть $i \leftrightarrow j$.[21]

3. Состояние i называется *существенным*, если оно сообщается с любым достижимым из него состоянием.[22] Остальные состояния называются *несущественными*.

Для существенных состояний верно следующее утверждение.

Предложение 2.1. *Все множество существенных состояний разбивается на непересекающиеся классы сообщающихся между собой состояний.*

Эти классы называются *эргодическими классами*.

На самом деле это утверждение лишь формально имеет отношение к марковским цепям. Во множестве S существенных состояний отношение $i \leftrightarrow j$ является отношением эквивалентности. Утверждается, что оно порождает разбиение множества S, причем внутри каждого подмножества этого разбиения все элементы эквивалентны. Природа множества S и отношения эквивалентности не играют никакой роли.

Определение 2.2. Марковская цепь[23] называется *неприводимой*, если все ее состояния являются существенными и принадлежат одному эргодическому классу.

Определение 2.3. Число d_i, равное НОД$\{n : p_{ii}(n) > 0\}$ называется *периодом* состояния i. Нас будут интересовать периоды только существенных состояний.

Предложение 2.2. *Все состояния одного эргодического класса имеют один и тот же период.*

Определение 2.4. Эргодический класс называется *непериодическим*, если периоды его состояний равны единице.

Определение 2.5. Марковская цепь называется *эргодической*, если она неприводима и непериодическая.

Заметим, что все описанные понятия зависят не от конкретных значений вероятностей p_{ij}, а только от того, являются ли они положительными или нет.

Простое условие эргодичности марковской цепи выглядит следующим образом.

Предложение 2.3. *1. Если существует такое n_0, что $\inf_{i,j} p_{i,j}(n_0) > 0$, то марковская цепь является эргодической.*[24]

2. Для конечных марковских цепей условия эргодичности и положительности всех элементов матрицы $\mathbb{P}^{n_0}$ при некотором n_0 являются эквивалентными.

[18] Видимо, здесь не существует устойчивой терминологии. Кроме того, мы ограничиваемся только теми определениями и утверждениями, которые используются при решении задач.

[19] «У меня всегда есть шанс перейти из i в j.»

[20] Можно рисовать состояния марковской цепи в виде вершин графа, а соотношения $i \to j$ в виде его направленных ребер. При небольшом числе состояний это может помочь в понимании дальнейшего материала.

[21] Конечно, это может происходить за разное число шагов.

[22] Иначе говоря, если $i \to j$, то $j \to i$. «Если я могу из i перейти в j, то я могу и вернуться».

[23] Точнее — семейство марковских цепей с одной и той же переходной матрицей. В литературе, однако, для краткости принято говорить об одной марковской цепи.

[24] Неприводимость здесь очевидна. Непериодичность легко выводится из равенства Чепмена-Колмогорова (2.1). Само условие $\inf_{i,j} p_{i,j}(n_0) > 0$ означает, что множество элементов матрицы $\mathbb{P}^{n_0}$ отделено от нуля.

2.2 Каноническое представление переходной матрицы

Общее представление. Рассмотрим для примера конечную однородную марковскую цепь с d состояниями, которые разбиваются на 2 эргодических класса[25] (с k и ℓ состояниями соответственно) и множество несущественных состояний, число которых равно $m = d - k - \ell > 0$. Как всегда, обозначим $\mathbb{P}$ переходную матрицу этой марковской цепи

Перенумеруем состояния марковской цепи так, чтобы первые k новых состояний входили в первый эргодический класс, следующие ℓ состояний — во второй эргодический класс, а состояния с последними номерами были несущественными. Тогда новая переходная матрица $\mathbb{Q}$ приобретет следующую *каноническую форму*:

$$\mathbb{Q} = \begin{pmatrix} \mathbb{P}_1 & \mathbf{0}_{kl} & \mathbf{0}_{km} \\ \mathbf{0}_{lk} & \mathbb{P}_2 & \mathbf{0}_{lm} \\ \mathbb{R}_1 & \mathbb{R}_2 & \mathbb{R}_3 \end{pmatrix}, \tag{2.2}$$

где $\mathbf{0}_{ij}$ обозначает нулевую матрицу с i строками и j столбцами.

Разберемся в структуре этой матрицы. Матрица $\mathbb{P}_1$ образована вероятностями перехода[26] внутри первого эргодического класса (а матрица $\mathbb{P}_2$ — внутри второго). Нулевые матрицы $\mathbf{0}_{kl}$ и $\mathbf{0}_{km}$ соответствуют тому, что мы не можем выйти из эргодического класса — ни в другой эргодический класс, ни в несущественное состояние. Аналогично нулевая матрица $\mathbf{0}_{lk}$ показывает, что невозможно из второго эргодического класса попасть в первый. Матрицы $\mathbb{R}_1, \mathbb{R}_2$ и $\mathbb{R}_3$ описывают вероятности перехода из несущественных состояний в первый эргодический класс, во второй эргодический класс и обратно в множество несущественных состояний.

Из представления (2.2) видно, что каждый эргодический класс может служить основой для своей собственной марковской цепи (в данном примере — с переходными матрицами $\mathbb{P}_1$ или $\mathbb{P}_2$), если только задать начальное распределение, сосредоточенное на множестве его состояний.

Структура состояний периодической неприводимой марковской цепи. Для простоты рассмотрим случай, когда все состояния неприводимой марковской цепи имеют период 2. По определению это означает, что, выйдя из любого состояния i, мы можем вернуться туда только через четное число шагов.

Далее, описываемая марковская цепь является неприводимой, то есть для любых i, j существуют такие n и m, что $p_{ij}(n) > 0$ и $p_{ji}(m) > 0$. Так как $p_{ii}(n+m) \geq p_{ij}(n)p_{ji}(m)$[27], то числа m и n обязаны иметь одинаковую четность. Иначе говоря, если я могу перейти из i в j за четное число шагов, то и вернуться могу только за четное число шагов, а если могу перейти за нечетное число шагов, то и вернуться могу только за нечетное.

Отсюда следует, что для любого i все состояния марковской цепи делятся на 2 класса: то множество I_i состояний, в которые можно попасть из i за четное число шагов[28] и остальные, образующие множество J_i. При этом, как нетрудно понять,[29] $I_j = I_i$ для всех таких состояний j, куда из i можно попасть за четное число шагов.

Таким образом, все состояния марковской цепи делятся на 2 непересекающихся класса I и J, в каждом из которых собраны состояния, переход из одного в другой возможен только за четное число шагов. При этом переход из состояния $i \in I$ в одно из состояний $j \in J$ автоматически происходит за 1 шаг.

[25] Конечно, количество эргодических классов здесь не имеет значение. Здесь и далее именно два класса выбраны только для удобства изложения.

[26] За один шаг.

[27] См. равенство Чепмена-Колмогорова.

[28] В I_i входит и само состояние i.

[29] Действительно?

Перенумеруем теперь состояния марковской цепи. А именно, в качестве первых состояний возьмем все состояний их класса I, а затем расположим состояния из J. Тогда получится каноническое представление нашей переходной матрицы, которое имеет вид

$$\mathbb{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{km} & \mathbb{P}_1 \\ \mathbb{P}_2 & \mathbf{0}_{mk} \end{pmatrix}, \tag{2.3}$$

где $k = \operatorname{card} I$, а $m = \operatorname{card} J$.

Матрицы $\mathbb{P}_1$ и $\mathbb{P}_2$ (их размеры $k \times k$ и $m \times m$) сами по себе являются переходными матрицами некоторых марковских цепей (сумма чисел по строкам этих матриц равна 1).

Рассмотрим теперь матрицу $\mathbb{Q}^2$, элементами которой являются вероятности $p_{ij}(2)$. Как уже говорилось, эти вероятности равны нулю, если $i \in I$, а $j \in J$.[30] То есть марковская цепь с переходной матрицей $\mathbb{Q}^2$ обладает двумя эргодическими классами — I и J. Нетрудно видеть, что каждый из этих эргодических классов имеет период 1.[31]

3 Финальные вероятности и стационарные распределения

Здесь мы снова имеем дело с однородными марковскими цепями.[32]

3.1 Общие определения

Определение 3.1. Если для каждых i и j существует предел $p_j = \lim_{n\to\infty} p_{ij}(n)$, причем $\sum_j p_j = 1$, то распределение $p = (p_1, \ldots, p_k, \ldots)$ называется *финальным распределением*, а числа ρ_j — *финальными вероятностями*.[33]

Несколько комментариев.

Замечание 3.1. 1. Обратите внимание, что предел $\lim_{n\to\infty} p_{ij}(n)$ должен не зависеть от i! На языке матриц это означает, что матрицы $\mathbb{P}^n$ имеют предел, то есть стремятся (поэлементно) к некоторой матрице Π, которая должна иметь одинаковые строки с элементами p_j.

2. Ясно, что $p_j \geq 0$. Условие $\sum_j p_j = 1$ имеет смысл только для счетного числа состояний марковской цепи, при конечном числе состояний оно выполняется автоматически.[34]

Определение 3.2. Распределение π называется *стационарным распределением* семейства однородных марковских цепей с переходной матрицей $\mathbb{P}$, если выполняется равенство $\pi\mathbb{P} = \pi$.[35]

Термин «стационарное распределение» может быть объяснен следующим образом. Рассмотрим марковскую цепь $\xi_0, \xi_1, \ldots$ с переходной матрицей $\mathbb{P}$ и начальным распределением π, которое удовлетворяет равенству $\pi\mathbb{P} = \pi$. Тогда $\mathcal{L}(\xi_n) = \pi$ для любого n. Более того,[36] для любых n и m

$$\mathrm{P}\big(\xi_m = i_0, \xi_{m+1} = i_1, \ldots, \xi_{m+n-1} = i_{n-1}, \xi_{m+n} = i_n\big) = \mathrm{P}\big(\xi_0 = i_0, \xi_1 = i_1, \ldots, \xi_{n-1} = i_{n-1}, \xi_n = i_n\big),$$

[30] Или наоборот — если $i \in J$, а $j \in I$.

[31] Убедитесь в этом.

[32] Более подробно (и со всеми доказательствами) этот материал можно прочитать в первом томе классической книги В. Феллера «Введение в теорию вероятностей и ее приложения», гл. XV (было 3 или 4 издания на русском языке). Некоторую дополнительную информацию содержит гораздо более элементарная книга Дж. Кемени и Дж. Снелла «Конечные цепи Маркова», Наука, 1970. А вообще, в каждом уважающем себя учебнике по теории вероятностей что-то про марковские цепи обязательно есть.

[33] Иногда — *предельным распределением* и *предельными вероятностями*.

[34] Почему? И почему в счетном случае это может быть не так?

[35] Напоминаем, что здесь слово «распределение» означает вектор-строку с неотрицательными компонентами, в сумме дающими 1. Число компонент этого вектора совпадает с числом элементов фазового пространства. С алгебраической точки зрения равенство $\pi\mathbb{P} = \pi$ означает, что распределение π является левым собственным вектором матрицы $\mathbb{P}$, соответствующим собственному числу, равному 1. В принципе, такое распределение не обязано быть единственным.

[36] Докажите это!

то есть совместное распределение любого числа случайных величин, образующих марковскую цепь, не зависит от сдвигов по времени — оно является «стационарным».

3.2 Финальные вероятности и стационарные распределения для конечных цепей Маркова

Далее мы будем рассматривать только конечные цепи Маркова. Для конечных марковских цепей связь между финальными вероятностями и стационарными распределениями описывается следующим образом.

Теорема 3.1. *Пусть множество $X = \{x_1, \ldots, x_d\}$ является конечным. Рассмотрим семейство марковских цепей с фазовым пространством X и переходной матрицей $\mathbb{P}$ и предположим, что у него существует финальное распределение $p = (p_1, \ldots, p_d)$. Тогда имеют место следующие утверждения.*

1. Распределение p является единственным стационарным распределением.

2. Пусть $\xi_0, \xi_1, \ldots, \xi_n, \ldots$ — однородная марковская цепь с переходной матрицей $\mathbb{P}$ и некоторым начальным распределением π. Тогда $\mathcal{L}(\xi_n) \overset{\mathrm{Var}}{\to} p$.

3. Пусть $f : X \mapsto \mathbb{R}$. Тогда для любого начального распределения π

$$\frac{f(\xi_0) + \ldots + f(\xi_{n-1})}{n} \xrightarrow{\mathrm{P}} J(f) \overset{\mathrm{def}}{=} \sum_{i=1}^{d} f(x_i) p_i \tag{3.1}$$

при $n \to \infty$.

Прокомментируем эту теорему.

Замечание 3.2. 1. Первое ее утверждение говорит, что существование финальных вероятностей гарантирует существование единственного стационарного распределения, которое и состоит из этих вероятностей. Тут комментировать особенно нечего.

2. Второе утверждение[37] можно назвать утверждением о том, что при большом n рассматриваемая марковская цепь «выходит на стационар». А именно, если бы начальное распределение π было равно p, то, как уже говорилось, $\mathcal{L}(\xi_n)$ равнялось бы этому начальному распределению. А если π не равно p, то происходит тоже самое, но асимптотически: при больших n распределение $\mathcal{L}(\xi_n)$ почти равно p.

3. Наконец, третье утверждение имеет вид слабого закона больших чисел. Действительно, пусть начальное распределение π снова совпадает со стационарным ρ. Тогда случайные величины $f(\xi_i)$ одинаково распределены и $\mathrm{E} f(\xi_i) = J(f)$. Так что мы по определению и имеем СЗБЧ.[38]

Однако в (3.1) утверждается больше: сходимость по вероятности имеет место и тогда, когда начальное распределение отличается от стационарного.[39]

Разберемся теперь, когда же существуют финальные вероятности и что происходит со стационарным распределением, когда они не существуют. Начнем с эргодических цепей.

Эргодические марковские цепи. Для конечных цепей Маркова есть естественное необходимое и достаточное условие существования строго положительных финальных вероятностей.

[37] Докажите его! Оно простое.

[38] Только случайные величины $f(\xi_i)$ не обязаны быть независимыми!

[39] Такого сорта утверждения называются «эргодическими теоремами». Физики их любят формулировать так: «среднее по времени (асимптотически) совпадает со средним по пространству». Сходимость в (3.1), в частности, используется в методе Монте-Карло.

Предложение 3.1. *Пусть множество X является конечным. Рассмотрим семейство марковских цепей с фазовым пространством X и переходной матрицей $\mathbb{P}$. Тогда*

1. для того, чтобы для этого семейства существовало финальное распределение $p = (p_1, p_2, \ldots)$ с **положительными**[40] *вероятностями p_i, необходимо и достаточно, чтобы марковская цепь была эргодической.*[41]

2. при этом $p_i = 1/\mu_i$, где μ_i — среднее число шагов до возвращения марковской цепи в состояние i при условии, что она вышла из этого состояния.[42]

Таким образом, эргодичность марковской цепи гарантирует нам существование финальных вероятностей, которые к тому же являются строго положительными.

Один эргодический класс с периодом 1 и несущественные состояния. Теперь немного усложним ситуацию и будем считать, что фазовое пространство марковской цепи состоит из одного эргодического класса с k состояниями плюс m несущественных состояний.

Каноническая форма перестроенной переходной матрицы будет выглядеть следующим образом:

$$\mathbb{Q} = \begin{pmatrix} \mathbb{P}_1 & \mathbf{0}_{km} \\ \mathbb{R}_1 & \mathbb{R}_2 \end{pmatrix}, \tag{3.2}$$

где матрица $\mathbb{P}_1$ — это переходная матрица, соответствующая эргодическому классу (причем здесь наблюдается неприводимость), матрица $\mathbb{R}_1$ описывает переходы из несущественных состояний в существенные, а матрица $\mathbb{R}_2$ — из несущественных состояний в несущественные.

Возведем $\mathbb{Q}$ в степень n и посмотрим, как ведут себя строки этой матрицы при $n \to \infty$. Ясно, что

$$\mathbb{Q}^n = \begin{pmatrix} \mathbb{P}_1^n & \mathbf{0}_{km} \\ \mathbb{R}_{1n} & \mathbb{R}_{2n} \end{pmatrix}, \tag{3.3}$$

где $\mathbb{R}_{1n}$ и $\mathbb{R}_{2n}$ — некоторые матрицы той же размерности, что $\mathbb{R}_1$ и $\mathbb{R}_2$.

Поскольку матрица $\mathbb{P}_1$ соответствует эргодической марковской цепи с k состояниями, то первые k строк матрицы $\mathbb{Q}^n$ имеют одинаковый предел вида $p = (p_1, \ldots, p_k, 0, \ldots, 0)$, где $p_1, \ldots, p_k$ — финальные вероятности, порожденные переходной матрицей $\mathbb{P}_1$,[43] а число нулей в p равно m.

Оказывается, что последние m строк матрицы $\mathbb{Q}^n$ обладают тем же свойством. А именно, матрица $\mathbb{R}_{2n}$ стремится к нулевой матрице, а матрица $\mathbb{R}_{1n}$ в пределе имеет одинаковые строки вида $p = (p_1, \ldots, p_k, 0, \ldots, 0)$.[44]

Таким образом, для описываемой ситуации снова имеет место Теорема 3.1, причем положительные финальные вероятности будут соответствовать состояния эргодического непериодического класса, а нулевые — несущественным состояниям.[45]

Случай нескольких эргодических классов. Если фазовое пространство состоит из двух эргодических классов и нескольких несущественных состояний, то каноническая форма $\mathbb{Q}$ соответствующей переходной матрицы имеет вид (2.2). Тогда, очевидно

$$\mathbb{Q}^n = \begin{pmatrix} \mathbb{P}_1^n & \mathbf{0}_{kl} & \mathbf{0}_{km} \\ \mathbf{0}_{lk} & \mathbb{P}_2^n & \mathbf{0}_{lm} \\ \mathbb{R}_{1n} & \mathbb{R}_{2n} & \mathbb{R}_{3n} \end{pmatrix}. \tag{3.4}$$

[40] Это существенно!

[41] или (см. второе утверждение Предложения 2.3), чтобы $\min_{i,j} p_{ij}(n_0) > 0$ для некоторого $n_0 \geq 1$.

[42] Этой красивой и неочевидной формулой мы пользоваться не будем.

[43] То есть $p_i > 0$ и их сумма равна 1.

[44] Первый из этих фактов легко понять, так как элементы матрицы $\mathbb{R}_{2n}$ равны вероятностям перейти из одного несущественного состояния в другое несущественное. Поскольку из любого несущественного состояния мы обязательно попадем в какое-то существенное, а обратно нам не вернуться по определению, то такие вероятности должны стремиться к нулю (попробуйте доказать этот простой факт строго). Второе утверждение существенно сложнее.

[45] То есть несущественные состояния в этом смысле действительно оказываются «несущественными».

Из (3.4) сразу же следует, что никаких финальных вероятностей в этом случае не существует. Со стационарными распределениями дело обстоит хитрее.

Пусть пока несущественных состояний нет вовсе, а **оба эргодических класса матрицы $\mathbb{Q}$ являются непериодическими**. Тогда матрица $\mathbb{Q}^n$ имеет предел $\mathbb{T}$,

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} \mathbb{T}_1 & \mathbf{0}_{k\ell} \\ \mathbf{0}_{\ell k} & \mathbb{T}_2 \end{pmatrix}, \tag{3.5}$$

где каждая из матриц $\mathbb{T}_1 = \lim \mathbb{P}_1^n$ и $\mathbb{T}_2 = \lim \mathbb{P}_2^n$ имеет одинаковые строки, которые мы обозначим $r = (r_1, \ldots, r_k)$ и $s = (s_1, \ldots, s_\ell)$, причем $r_j > 0$, $s_j > 0$ и $\sum_{j=1}^k r_j = \sum_{j=1}^\ell s_j = 1$.[46] Как уже обсуждалось, $r\mathbb{P}_1 = r$ и $s\mathbb{P}_2 = s$.

Введем теперь вектора-строки размерности $k + \ell$ следующим образом[47]

$$p^{(1)} = (r_1, \ldots, r_k, 0, \ldots, 0), \quad p^{(2)} = (0, \ldots, 0, s_1, \ldots, s_\ell), \tag{3.6}$$

и для любого $a \in [0, 1]$ положим

$$p = p(a) = ap^{(1)} + (1 - a)p^{(2)}. \tag{3.7}$$

Тогда, очевидно,[48] $p(a)$ будет стационарным распределением исходной марковской цепи. Кроме того, других стационарных распределений вообще не существует.[49]

Этот факт легко понять. Предположим, что наша марковская цепь «выходит» из некоторого состояния, принадлежащего первому эргодическому классу. Поскольку этот класс неприводим и непериодичен, то мы не можем выйти из него, а соответствующие финальные вероятности (и стационарное распределение) для этого класса равны r. Аналогичные рассуждения верны и для второго классы (для него стационарное распределение равно s), а формула (3.7) означает, что мы с вероятностью a попадаем в первый класс, с вероятностью $1 - a$ — во второй, а внутри этих классов берем их стационарные распределения.

Вернемся теперь к общему случаю матрицы (2.2), n-я степень которой имеет вид (3.4). Здесь несложно предугадать общий вид стационарного распределения.[50] В вектора-строки $p^{(1)}$ и $p^{(2)}$, определенные в (3.6), нужно добавить по m нулевых последних координат, а потом снова применить формулу (3.7).[51]

Сложнее оказывается не имеющий непосредственного отношение к связи между финальными вероятностями и стационарными распределениями вопрос о существовании предела матриц $\mathbb{Q}_n$, имеющих вид (3.4). Как мы уже выяснили, в случае отсутствия несущественных состояний этот предел существует.[52] Из (3.4) видно, что речь идет о существовании предела матриц $\mathbb{R}_{1n}$, $\mathbb{R}_{2n}$ и $\mathbb{R}_{3n}$. Естественно ожидать, что $\mathbb{R}_{3n}$ стремится к нулевой матрице (она соответствует переходам из несущественных состояний в несущественные). Конечно, так оно и есть.

Можно доказать, что матрицы $\mathbb{R}_{1n}$ и $\mathbb{R}_{2n}$ тоже имеют пределы и даже выписать их вид. Оказывается, $\mathbb{R}_{1n} \to \mathbb{B}_1\mathbb{T}_1$ и $\mathbb{R}_{2n} \to \mathbb{B}_2\mathbb{T}_2$, где диагональна матрица $\mathbb{B}_1$ имеет на своей главной диагонали вероятности рано или поздно попасть из каждого из несущественных состояний в первый эргодический класс (а диагональная матрица $\mathbb{B}_2$ — во второй).[53] Таким образом,

$$\mathbb{Q}^n \to \begin{pmatrix} \mathbb{T}_1 & \mathbf{0}_{kl} & \mathbf{0}_{km} \\ \mathbf{0}_{lk} & \mathbb{T}_2 & \mathbf{0}_{lm} \\ \mathbb{B}_1\mathbb{T}_1 & \mathbb{B}_2\mathbb{T}_2 & \mathbf{0}_{mm} \end{pmatrix}.$$

[46] Это является примером ситуации когда $\lim_n \mathbb{Q}^n$ существует, а финальные вероятности — нет.

[47] у $p^{(1)}$ — ℓ последних нулей, а у $p^{(2)}$ — k первых.

[48] Действительно?

[49] Докажите это.

[50] Конечно, по-прежнему предполагается, что оба эргодических класса имеют период 1.

[51] Точно такая же процедура была ранее применена при рассмотрении одного эргодического непериодического класса с несколькими несущественными состояниями.

[52] Как и в случае одного непериодического эргодического класса и нескольких несущественных состояний.

[53] См. цитированную главу из книги В. Феллера. Там, в частности, выведена система уравнений, решением которой являются диагональные элементы матрицы $\mathbb{B}_j$.

Результат, конечно, полностью согласуется с ситуацией одного эргодического непериодического класса и нескольких несущественных состояний.

Периодические эргодические классы. До сих пор все рассматриваемые эргодические классы имели период 1. Нам осталось разобраться с ситуацией, когда они являются периодическими.

Пусть фазовое пространство некоторой конечной марковской цепи состоит из одного эргодического класса, имеющего период 2. Соответствующая каноническая форма переходной матрицы у нас уже записана, см. формулу (2.3). Из нее сразу же следует, что финальных вероятностей не существует: например, если $i, j \in I$, то $p_{ij}(n) = 0$ при нечетных n, а при четных $n \to \infty$ имеет предел, определяемый первым эргодическим (и непериодическим) классом матрицы $\mathbb{Q}^2$. Если же $i \in I$, а $j \in J$, то ситуация обратная: последовательность $p_{ij}(n) = 0$ при четных n и имеет положительный предел при нечетных n, стремящихся к бесконечности.

В тоже время можно доказать, что стационарное распределение существует и его вероятности, как и в случае эргодической марковской цепи, равны $1/\mu_i$, где μ_i — среднее время первого возвращения в состояние i марковской цепи, вышедшей из этого состояния.

Учет несущественных состояний и случай нескольких эргодических классов проводится абсолютно аналогично случаю с непериодическими эргодическими классами и специально не описывается.

Резюме. Итак, кратко сформулируем итог этих рассмотрений в виде теоремы, касающейся конечных цепей Маркова.

Теорема 3.2. *1. Стационарные распределения в конечной цепи Маркова всегда существуют, но не всегда единственны.*
2. Вероятности стационарного распределения, соответствующие несущественным состояниям, всегда являются нулевыми.
3. Для единственности стационарного распределения необходимо и достаточно, чтобы пространство состояний марковской цепи состояла из одного эргодического класса и, возможно, нескольких несущественных состояний. При этом вероятности стационарного распределения, соответствующие существенным состояниям, положительны.
4. Финальные вероятности в конечной цепи Маркова существуют тогда и только тогда, когда фазовое пространство состоит из одного непериодического эргодического класса и, может быть, нескольких несущественных состояний. При этом положительные финальные вероятности будут соответствовать существенным состояниям, а нулевые финальные вероятности — несущественным.
5. В этих же условиях стационарное распределение совпадает с вектор-строкой финальных вероятностей.
6. Если марковская цепь содержит несколько эргодических классов, то существует бесконечное число стационарных распределений. Каждое из них представляет собой произвольную смесь «расширенных»[54] *стационарных распределений, соответствующих всем эргодическим классам.*

[54]Здесь термин «расширение» использован для краткости. На самом деле имеется в виду операция «добавления нулей», описанная ранее при рассмотрении двух эргодических непериодических классов. См. формулы (3.6) и (3.7).