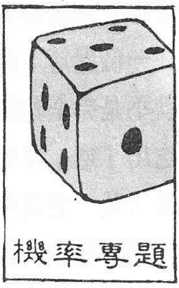


馬可夫鏈的簡介

浩浩

一、前言

在一般及常用的統計中，彼此相互「獨立」大概是最有用的一個概念。用最簡單的術語來說，互相「獨立」就是彼此毫不相干，一點牽涉都沒有。好比說：大黃在台北早上是不是吃海鮮和老馬在基隆晚上是不是吃海鮮是兩件互相獨立的事件。互相獨立的概念之所以有用，最重要的原因之一就是因爲它簡單，幾乎任何人都很容易明白。但我們今天要談的馬可夫

鏈可就不是這樣了。馬可夫鏈是要討論不是互相獨立的一些事件。以大黃和老馬吃海鮮的例子來說，如果大黃和老馬是住在一個屋簷下的話，早上吃海鮮和晚上吃海鮮就不是完全無關的兩件事了！有的時候吃海鮮吃出了癮，非要連吃好幾頓才行；這樣的話如果大黃、老馬早上吃了海鮮，他們晚上還是吃海鮮的機會就很大了。當然也有可能就是早上吃了海鮮覺得晚上換一種口味比較可口，這樣的話早上吃了海鮮，那麼晚上再吃的機會就比較小了。總之，這個例子只是要說明不是互相獨立的事件也是很容易在日常生活碰到的，更不用說在稍微複雜一點的的統計中更是會經常碰到的。但在這樣一個籠統的名辭「不是互相獨立」下，我們要怎樣了解它呢？「不是互相獨立」也就是說互相相關的意思，但是要怎樣相關呢？如何在相關中做一些簡單的分類呢？馬可夫鏈就是要描述在「相關」這個概念中最簡單的一種。但那是如此，有關馬可夫鏈的理論已經相當豐富了。在機率的理論中，它幾乎佔了絕大的部份。以下我們就慢慢的說明它的一些性質。

二、定　義

設想我們在做一連串的試驗，而每次試驗所可能發生的結果定爲 E_1 ，E_2 ，……E_n ，……。(可能是有限也可能是無限。)每一個結果 E_k，我們若能給定一個出現的可能性 P_k(即機率)，則對某一特定之樣本序列 $E_{i_1}E_{i_2}\cdots E_{i_n}$ ，我們知道它出現的機率是 $P(E_{i_1}E_{i_2}\cdots\cdots E_{i_n})=P_{i_1}\cdots P_{i_n}$。這個是試驗與試驗彼此互相獨立的基本精神。但在馬可夫鏈的理論中，我們的目的就是要擺脫「獨立」的這個假設，因此我們沒有辦法知道(也就是沒有辦法給定)每一個事件出現的可能性；也就是說"P_k"是不存在的。不過我們總得要知道一些東西才能討論，所以在馬可夫鏈中我們考慮最簡單的「相關」性。在這種情況下，我們不能給任一個事件 E_j 一個機率 P_j，但我們給一對事件 (E_j, E_k) 一個機率 P_{jk} ，這個時候 P_{jk} 的解釋是一種條件機率，就是假設在某次試驗中 E_j 已經出現，而在下一次試驗中 E_k 出現的機率。除了 P_{jk} 之外，我們還須要知道第一次試驗中 E_j 出現的機率 a_j 。有了這些資料之後，一個樣本序列 $E_{i_0}E_{i_1}\cdots E_{i_n}$ (也就是說第零次試驗結果是 E_{i_0}，第一次試驗是 E_{i1} …第 n 次試驗是 E_{i_n})的機率就很清楚的是 $P(E_{i_0}, E_{i_1}, \cdots E_{i_n})=a_j\, p_{i_0i_1}p_{i_1i_2}\cdots p_{i_{n-1}i_n}$。

有了以上的概念，現在讓我們用一些數學符號來表示這些數量。在常用的術語中，用 S 表示狀態空間，也就是一個試驗所有可能出現的狀態所成的集合。令 X_n 表示在第 n 次試驗的結果。所以 X_n 是一個隨機變數，它的取值是在狀態空間 S 中。

定義：一組取值在 S 中的隨機變數 X_0, X_1, X_2…… 稱爲馬可夫鏈，如果它滿足以下的條件：

(1) $P(X_{n+1}=x_{n+1} \mid X_0=x_0\cdots X_n=x_n)=P(X_{n+1}=x_{n+1} \mid X_n=x_n)$

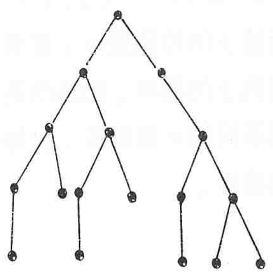
其中 $x_0, x_1\cdots, x_{n+1}$ 皆屬於 S 。

(1)式的意思是說我們以 P_{xy} 或 $P(x, y)$ 表示 $P(X_{n+1}=y \mid X_n=x)$，假設我們知道從第0次至第 n 次的試驗結果，則第 $n+1$ 次的試驗結果僅僅和第 n 次的試驗結果有關，我們舉一些例子來看：(爲了簡單起見，本文只討論平穩的馬可夫鏈。也就是說(1)中的轉換機率和狀態有關但和時刻無關)。

例一：設有一賭徒甲帶了現金若干去賭場賭博。如果他每贏一次則贏一元而每輸一次也輸一元，同時贏的機率是 p (輸的機率就是 $q=1-p$)，則 $X_0, X_1, X_2, \cdots\cdots$ 顯然是一個馬可夫鏈。(X_n 表示他賭了 n 次後手中所有的資金)爲什麼呢？因爲僅僅須要知道 X_n 的值就足以預測 X_{n+1} 的值，另外 $X_0 X_1\cdots X_{n-1}$ 的值並不能幫助我們做更好的預測。在這個例子中，

$$P(x,y)=\begin{cases} p & \text{如果 } y=x+1 \\ 1-p & \text{如果 } y=x-1 \\ 0 & \text{如果 } y\neq x+1 \text{ 或 } x-1 \end{cases}$$

例二：（衍生鏈）設想在細胞分裂或是中子分裂的情況。第0代的細胞數（起始點）設爲X_0，從第n代衍生出來的細胞個數稱爲第$n+1$代，用X_{n+1}表示。在衍生的過程中，一個細胞可以分裂成二個也可能保持不變，也可能消失或（死亡），若畫圖表之，這種衍生有點像樹枝狀：



第0代
第1代
第2代
⋮

在這個例子中，X_0，X_1…是一個馬可夫鏈。因爲第n＋1代的個數顯然是和第n代的個數有關，但另外再告訴我們第0，1，…$n-1$代的個數並不能幫助我們做更好的估計。

例三：假設有無窮多個瓶子，我們標以0，1，2，……。每一個瓶子中放不同個數球，每瓶中的球都標以B_0，B_1，B_2……等（不同的球可以有相同的編號），假設我們從標以0的瓶中隨便抽一個球，若此球的編號是B_j，則我們再從第j個瓶中抽取一球，若此球編號是B_k，我們再從第k個瓶中抽取一球，……這樣一直做一下去，我們就得到一個馬可夫鏈。原因和以前的幾個例子相同。事實上任何一個馬可夫鏈都和這個模型等價，我們只要適當的選取每個瓶中球的個數，同時加以適當的編號，我們就可得取第一和第二個例子。

例四、考慮一個基因由n個單位所合成的。在此n個單位中，每一個不是正常的就是突變的。現在這些細胞要分裂，分裂前基因先要完全複製一次，也就是有了2n個單位。假設一個細胞一分爲二，則此二個子細胞中的基因也是有n個單位，但此n個單位是由原來母細胞中2n個單位隨意挑出來的！若以X_n表示細胞分裂n次後某一個子細胞中突變單位的個數，則X_0，X_1，……也是一個馬可夫鏈。讀者可以試試看把$P(X_{n+1}=y\mid X_n=x)$寫出來。

$$p(x,y)=\frac{\binom{2x}{y}\binom{2n-2x}{n-y}}{\binom{2n}{n}}$$

三、一些簡單的性質

在以上的討論中我們不難發現馬可夫鏈和$p(x,y)$有很大的關係。我們不妨稱$p(x,y)$爲轉換機率（由x轉換成y），事實上一個馬可夫鏈完全由$p(x,y)$和起始分佈決定。起始分佈就是上面所有例子中的X_0的分佈。爲什麼起始分佈如此重要呢？我們想想看，$p(x,y)$只是一種條件機率，一假設已知第n步是x則第$n+1$步是y的機率。但如何確定第n步是不是x？這又牽涉到第$n-1$步是什麼狀態的問題。如此反推回去則我們必須知道這個馬可夫鏈最開始是什麼了！所以這就是爲什麼起始分布重要的原因！反過來說，一旦起始分布知道了，再加上轉換機率也固定了，那麼這個馬可夫鏈也就完全決定。

在一個狀態空間S含有n個元素的馬可夫鏈來說，起始分佈只是隨便一個機率分佈，我們經常用T_0表示。轉換機率$p(x,y)$又稱爲轉換矩陣，因爲$p(x,y)$可以用一個$n\times n$的矩陣表示。這個矩陣滿足什麼條件呢？第一：$p(x,y)\geqslant 0$，第二，$y\in S$，對每一個$x\in S$來說$\Sigma\, p(x,y)=1$，也就是說此矩陣中每個元素皆是正數（可以是0）同時每一列加起來都是1。在以後討論中，我們只看起始分佈及轉換矩陣，至於原來的馬可夫鏈從何而來我們就不去管了！有時候$p(x,y)$也稱爲一步轉換，因爲它是表示第n步與第$n+1$步的關係。現在我們可以定義何謂n步轉換。假設在狀態x_i時經過n次轉換才轉換至x_k，也就是說

$$x_j \to x_{j,1} \to x_{j,2} \to x_{j,3} \to \cdots\cdots\cdots \to x_{j,n-1} \to x_k$$

如果這種轉換是經由以上的過程，則其機率很顯然是 $p(j, j_1)\ p(j_1, j_2)\cdots p(j_{n-1}, k)$。若我們把所有的可能過程加起來則得到第 r 步在 x_j 但第 $r+n$ 步在 x_k 的機率，我們用 $p^{(n)}_{j,k}$ 表示。因此，當 $n=1$ 時，我們得到 $p^1(j,k)=p(j,k)$，當 $n=2$ 時，$p^{(2)}_{(j,k)}=\sum_{v\in S} p_{jv}p_{vk}$ 若用歸納法，可得以下之公式

$$P^{(n+1)}_{j,k}=\sum_{v\in S} p^{n}_{j,v}\ p_{v,k} \quad \text{或是}$$

$$p^{(m+n)}_{j,k}=\sum_{v\in S} p^{m}_{j,v}\ p^{(n)}_{v,k}$$

和 n 步轉換機率有關的一個觀念是抵達時間。我們簡單描述如下：

設 $A\leq S$ 爲狀態空間的一個子集合。設 $X_0, X_1\cdots$ 爲一馬可夫鏈，則抵達 A 的時間定義爲：

$$T_A=min\ \{n>0\ ,\ X_n\in A\}$$

也就是說 T_A 是這個馬可夫鏈第一次抵達 A 的時間。請注意此地 T_A 的定義中 n 是大於零的數，也就是說 $T_A>0$。即使一開始就在 A 中 ($X_0\in A$) 但 T_A 還是大於 0。我們證明下面這個簡單的定理。

定理1：$P^n(x,y)=\sum_{m=1}^{n} P_x(T_y=m)P^{n-m}(y,y)$。(此處 P_x 是表示馬可夫鏈是從 x 開始，也就是說 $X_0\equiv x$)。

證明：$P^n(x,y)$

$$=P_x(X_n=y)$$

$$=\sum_{m=1}^{n} P_x(T_y=m\ ,\ X_n=y)$$

$$=\sum_{m=1}^{n} P_x(T_y=m)P(X_n=y \mid X_0=x\ ,T_y=m)$$

$$=\sum_{m=1}^{n} P_x(T_y=m)\ P(X_n=y \mid X_0=x_1\ \ X_1\neq y_1\cdots X_{m-1}\neq y,\ \ X_m=y)$$

$$=\sum_{m=1}^{n} P_x(T_y=m)P^{n-m}(y,y)$$

此證明最後一個式子是由馬可夫鏈的定義所得出的。

這個定理的意思是可以這樣解釋的：等式右邊中 $P_x(T_y=m)P^{n-m}(y,y)$ 是從 X 開始，第一次抵達 y 的時間是 m，接著在 $n-m$ 步中由 y 再回到 y 的機率。顯然的是如果我們把這些機率對不同的 m 加起來，會得到在 n 步中由 x 到 y 的機率。

四、各種狀態的分類——馬可夫鏈中基本的定理

定義2：兩個狀態 x，y 中，我們說從 x 可以到達 y 如果 $P_x(T_y<\infty)>0$。

這個定義是說從 x 開始，若有可能在有限的時間到達 y 的話，就叫做從 x 可以到達 y。我們用符號 $x\to y$ 表示。顯然的，$x\to y$ 和 $\sum_{n=1}^{\infty} P^n(x,y)>0$ 是等價的。

在數學的工作中一件最基本也是最重要之一的就是把看似複雜的研究對象加以分類，並藉由此分類加強對現象的了解。在看似雜亂無章的馬可夫鏈中我們如何分類呢？以下我們就要討論對某一特定的馬可夫鏈之狀態空間加以分類。我們先做以下之定義：

定義3：一個狀態 y 稱之爲輪迴的，如果 $P_y(T_y<\infty)=1$。

若　$P_y(T_y<\infty)<1$，則此狀態叫做短暫的。

按照以上之定義，我們知道若一個馬可夫鏈從一個輪廻狀態 y 開始，那麼它遲早會再回到 y，但從一個短暫狀態開始則它有可能永遠不會再回到自己！有了以上這個概念後，我們很自然的會想到〃幾次〃的概念；也就是說我們會想知道回到 y 究竟會有幾次！我們用符號 $N(y)$ 來表示。若用嚴格的數學符號表示，則

$$N(y)=\#\{n\geqslant 1,X_n=y\}$$

下面這個定理描述了輪廻與短暫這兩種不同狀態完全不同的性質。

定理2：(i)　設 y 爲短暫狀態。則 $P_x(N_y<\infty)=1$。

(ii)　設 y 爲輪廻狀態。則 $P_y(N_y=\infty)=1$。

這個定理描述了兩種不同狀態的完全不同之處。若從一個輪廻狀態 y 開始，則這個馬可夫鏈再回到自己的次數一定是無窮多次，但不論從何狀態開始，跑到了一個短暫的次數一定是有限的。事實上這很容易想像，因爲若從一個輪廻狀態開始，則它一定會回到自己，但一回到自己，用馬可夫鏈的定義，它又相當於從自己開始，所以又會再回來，反覆如此，當然 $N_y=\infty$ 了！對於短暫態我們也可以類似的推論，不過請讀者自己揣摩。若想做更精細一點的估計我們可以考慮對到達一個短暫狀態的平均次數。令 $G(x,y)$ 表示從 x 開起而到達 y 的平均次數，則

$$G(x,y)=\begin{cases}P_x(T_y<\infty)\\1-P_y(T_y<\infty)\end{cases}。$$

不過這件事實我們現在不去理會它的證明，以後也不會用到，僅僅做爲參考而已。

簡單了解兩種不同的狀態後，我們可以準備談分類的問題了！首先，我們在狀態中定義一種等價的關係。

定理4：對於兩個不同的狀態 x 及 y，我們說 x 和 y 是等價的如果 $P_x(T_y<\infty)=P_y(T_x<\infty)=1$。

換句話說，x 和 y 是等價的意思就是從 x 開始，遲早會到達 y 的，反之亦然。這個定義看似要求很多，但由下面這個定理就知道事實上不難：

定理3：設 x 爲輪廻狀態。則 x 和 y 等價若且唯若 y 也是輪廻狀態同時 $x\rightarrow y$。

至於這個定理的證明我們就不去深究了！但這個定理大大減化了證明 x 和 y 是等價的條件。第一：一個輪廻狀態絕不會和一個短暫狀態等價。第二：兩個輪廻狀態之是否等價端視 $P_x(T_y<\infty)$ 是否大於 0 而定。我們不再須要考慮 $P_x(T_y<\infty)$ 是否爲 1 了！

定理5：一個狀態空間的子集合 C 稱爲封閉的如果 $P(x,y)=0\ \ \forall x\in C, y\notin C$。如果 $x\rightarrow y\ \ \forall x,y\in C$，則稱 C 爲不可約的

有了以上這些定義，我們現在可以對狀態空間做一個最簡單粗淺的分類：以 S_R 表示輪廻狀態所成的集合，以 S_T 表示短暫狀態的集合。

定理4：狀態空間 S 可寫成 $S=S_R\cup S_T$，而 S_R 可寫成有限或無限多個的彼此分離的封閉不可約集合。

這個定理告訴我們一個馬可夫鏈的行爲。倘若我們從某一個封閉不可分的集合中的一個輪廻狀態開始，則此馬可夫鏈永遠停留在此一集合中，同時會到達此集合中任何一個狀態無窮多次。若從某一個短暫狀態開始，則此馬可夫鏈可能永遠停留在 S_T 中也可能跑到某一個

封閉不可約的集合中而陷於其中永遠出不來了！

這個定理的證明非常容易，僅僅用定義四把所有輪迴狀態與其等價的歸成一個集合，然後用定理三證明其爲一封閉不可約的集合即可，大概三言兩語讀者就可把這個定理證明出來了！

有了這些簡單的分類後，我們再回頭來看看以前的例子，試試能否用這些術語更淸楚的描述一下問題的性質。我們首先看衍生鏈：

在衍生鏈中，我們可想像狀態空間 $S=\{0, 1, 2, \cdots\cdots\}$，這個模型最重要的目的當然是決定在這個模型下，細胞會不會一定絕種，也就是說 $P_1(T_{\{0\}}<\infty)$ 是否爲 1？（此處 p_1 表示第 0 代的細胞數爲 1）。若 $p_1(T_{\{0\}}<\infty)=1$，則表示這種分裂方法最後會導致細胞絕種而 $p_1(T_{\{0\}}<\infty)<1$ 則表示不一定會絕種，若我們假設第 0 代有 n 個細胞，討論的方式和第 0 代只有一個細胞完全一樣，因爲 $P_n(T_{\{0\}}<\infty)=P_1^n(T_{\{0\}}<\infty)$。在這個例子中，0 是一個很特殊的狀態。首先，因爲 $P(0, 0)=1$，所以 0 是一個輪迴狀態。其次因爲所有的 $k>0$，$P_k(T_{\{0\}}<\infty)>0$（除了在最極端且無意義的情況下，所以除了 0 以外任何一狀態皆爲短暫的。（定理三）這個問題現在變成了從一個短暫狀態開始，到底是不是一定會碰到 0？如果答案是肯定的，則此細胞最後會歸於無有，但如果是否定的，則因爲除了 0 以外全是短暫狀態，所以最後細胞個數可能會趨近無窮大。這是個很有趣的現象，可以稱爲二一律，不是 0 就是 ∞，限於篇幅，我們不解這個問題了，但這個問題的答案我們述之如下：如果 a 表示平均一個細胞所分裂的個數，則 $P_1(T_{\{0\}}<\infty)=1$ 如果 $a<1$，反之若 $a>1$，則 $P_1(T_{\{0\}}<\infty)<1$。也就是說如果一個細胞平均有超過一個以上的後代，則有可能細胞數會趨近 ∞，反之若一個細胞平均有不及一個的後代，則一定會絕種。證明這件事不容易但看起來這個答案倒是頗爲合理的。

我們再看看例一。不過我們假設 X_n 可以取負值，表示賭徒負債的情況。在這樣的情形下，狀態空間 $S=\{\cdots -n, -n+1\cdots -1, 0, 1, 2, \cdots\cdots n, \cdots\cdots\}$ 爲所有的整數。爲了使情況簡化，我們假設 $P(x, x+1)=P(x, x-1)=\frac{1}{2}$。很顯然的，所有的 x，y，$P_x(T_y<\infty)>0$，所以 S 整個是一個封閉不可約的集合。問題是 0 是短暫狀態抑或是輪迴狀態？若 0 是短暫的，則所有的狀態皆是短暫的，若 0 是輪迴的則所有的狀態皆是輪迴的（定理三）。這個例子又稱爲隨機漫步，因爲我們可以想像一個人站在一條直綫上，有一半的機會他會向左跨一步，也有一半的機會，他會向右跨一步。我們想知道這個人最後會去那裏？是 $+\infty$ 或 $-\infty$？這是留在綫上左右搖擺不定？同樣的道理我們可以考慮一個人站在一個平面上的格子點上，每次他可以向前，後，左，右，各以 $\frac{1}{4}$ 的機會移動一步。甚至在更高的 3 維，4 維……以上的空間格子點，向他的鄰近各點以相同的機率移動，問題是最後這個人會去那裏？無論這個人是站在幾維的空間中，他從任一點開始，任何一點都有可能到達，所以所有的狀態或皆爲短暫的或皆爲輪迴的。最簡單的問題就是 0（原點）究竟是短暫的或是輪迴的？這個問題的答案是在一，二維時，原點是輪迴的但在三維以上的空間時，則原點是短暫的。讀者也許會覺得爲什麼會有如此奇怪的答案，事實上這和數學分析中的很多結果有密切的關係，希望有興趣的讀者自己去探討這個問題，我們會發現到數學中很多出發點完全不同的領域却有完全相似的結果。回到隨機漫步中去看看這樣的結果究竟是什麼意思呢？在一，二維中，隨機漫步的人是左右搖擺不定，忽左忽右，忽上忽下，每一個格子點他都得去，同時得去無窮多次。但在三維或更高的空間中，隨機漫步的人會愈來愈遠離原點，最後會跑到無窮遠去（雖然不沿著固定的方向）。

了解了以上這些概念後，我們可說對馬可

夫鏈的分類有了粗略的認識。但對於像定理二這樣一個「粗」的結果數學家是不會滿意的！爲什麼說它「粗」呢？因爲就一個輪廻狀態來說，定理二只告訴了我們$N_y=\infty$，也就是到達y的次數會是無窮多次，但我們不知道何時到達或是隔多久才會到達一次，對嗎？所以雖然似乎定理二已經告訴我們不少消息，但多事的數學家追著問這個問題：到底要隔多久一個馬可夫鏈從一個狀態才會回到自己去？也多虧了這個問題，我們對分類的問題才會有以下更精細的分類。

定義：一個輪廻狀態稱爲眞輪廻如果均回到自己的時間是有限的，否則則稱之爲虛輪廻。

注意以上這個「平均時間」的問題只適用於輪廻狀態，因爲對於短暫狀態顯然平均回到自己的時間是∞，如果一個輪廻狀態y是虛的，則表示從y開始，雖然一定再會回到y，但平均起來要等無窮大的時間，所以我們以虛輪廻稱之。若令m_y表示從y開始，平均要回到y的時間，則我們有以下的定理：

定理4：設C爲一封閉不可約同時由輪廻狀態所構成之集合且$P(X_0\in C)=1$ 則

$$\lim_{n\to\infty}\frac{N_n(y)}{n}=\frac{1}{m_y}$$

此處$N_n(y)$表示一個馬可夫鏈在時間n以前到達y的次數，這個定理的意思是說如果一個馬可夫鏈從和一個輪廻狀態y等價的狀態開始，則平均到達y的次數是$\frac{1}{m_y}$。若 $m_y=\infty$ 則$\frac{N_n(y)}{n}\to 0$，表示在這個馬可夫鏈的運動過程中幾乎看不到y。所以在這個意義下，一個虛輪廻狀態和一個短暫狀態是有類似的性質。我們不難想像如果要考慮馬可夫鏈的極限行爲(也就是當n很大時)時，只有實輪廻狀態有作用，其餘的皆可忽略！不過我們限於篇幅的關係不再繼續深究怎麼樣可以忽略其餘的狀態了。

五、結　論

馬可夫鏈的理論很有趣，應用也極廣，所用到的數學工具也較簡單。在機率這門科學中，可說是入門階。本期的其餘各篇文章中，很多都是和馬可夫鏈相關的，只是可能狀態空間複雜一些或採用連續的時間而不是我們所用的0，1，2……而已。本文僅是最粗淺的介紹有關此類理論的發展，拋磚引玉希望能引起讀者的興趣。至於內容的來源大部份是出自參考書目中的〔1〕、〔2〕。第〔3〕是一部較難的書，但較適合嚴謹的追求者，一般坊間皆有出售。

參考書目

(1) Fellep, W. *An Introduction to Probability Theory and Its Applications.* Vol.1, 2nd Edition Wiley, 1957.

(2) Hoel, P. Port, S., Stone, C., *Introduction to Stochastic Processes.* Houglition Mifflin, 1972.

(3) Karlin, S. *A First Conrse in Stochastic Processes.* 大學圖書出版社翻版，1968。

—本文作者任職於本所—