

作者	生姜 DrGinger
脚本	生姜 DrGinger
视频	崔崔 CuiCui
开源学习资源	https://github.com/Visualize-ML
平台	https://www.youtube.com/@DrGinger_Jiang https://space.bilibili.com/3546865719052873 https://space.bilibili.com/513194466

15.3 转移矩阵



本节你将掌握的核心技能：

- ▶ 转移矩阵的每个元素代表转移概率。
- ▶ 转移矩阵每一列元素之和为 1。
- ▶ 转移矩阵的幂和状态向量的乘法，推导任意天数后天气状态。
- ▶ 经过多次天气转移，状态向量趋于一个固定概率分布，称为稳态。
- ▶ 转移矩阵特征值为 1 的 (归一化) 特征向量对应稳态。



本节改编自《数据有道》第 20 章。

三个天气状态

如图 1 所示，某一个地区的天气只有三种状态——晴天、阴天和雨天。

而下一天天气状态仅仅依赖于当前天气：

- ◀ 如果当前为晴天，下一天 70% 可能性为晴天，25% 可能性为阴天，5% 可能性为雨天。
- ◀ 如果当前为阴天，下一天 45% 可能性为晴天，30% 可能性还是阴天，25% 可能性为雨天。
- ◀ 如果当前为雨天，下一天 55% 可能性为晴天，30% 可能性为阴天，15% 可能性还是雨天。

观察图 1，这实际上就是一幅有权有向图。

每个节点代表一种天气状态，每条有向边代表天气状态之间的转换；有向边的权重则代表概率值。

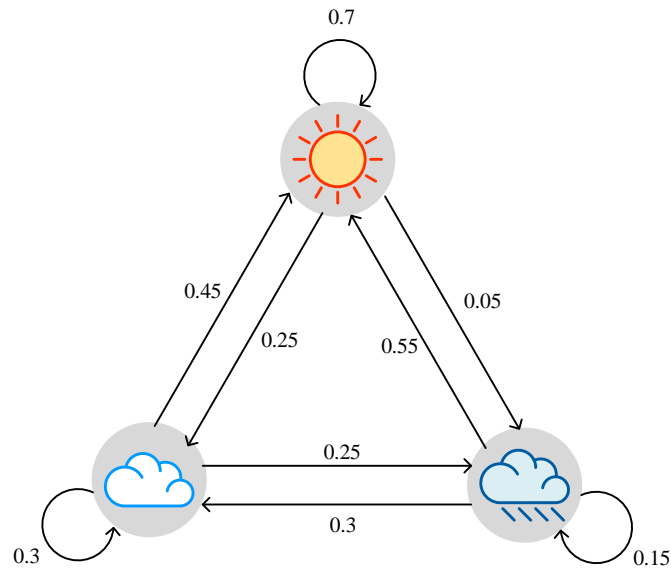


图 1. 三个天气状态相互转换

邻接矩阵

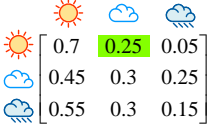
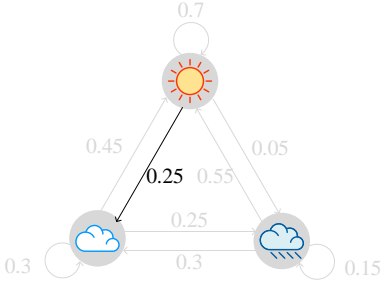
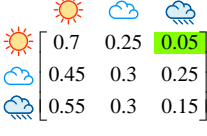
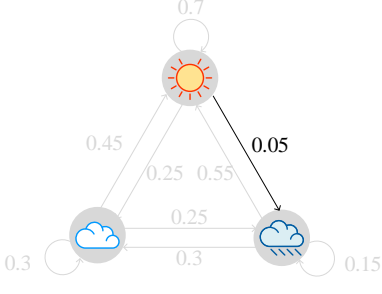
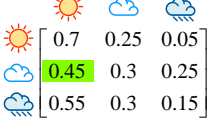
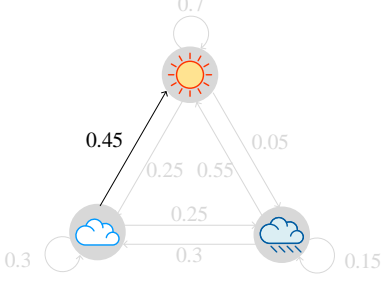
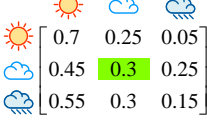
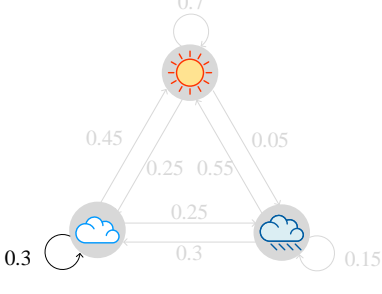
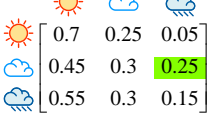
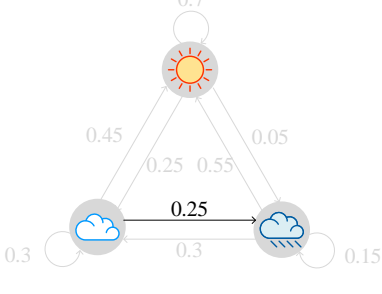
根据上一节内容，我们可以很容易得到图 1 这幅有向图的邻接矩阵 A

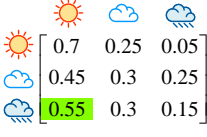
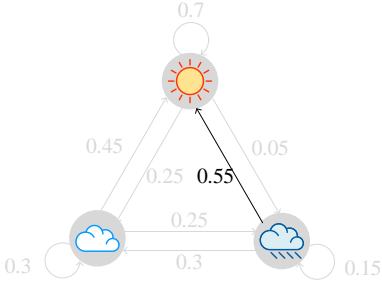
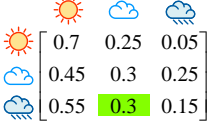
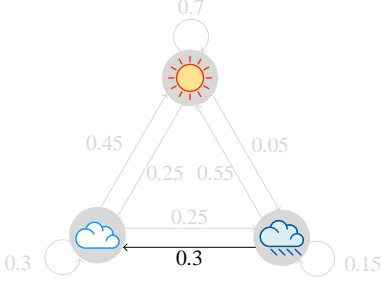
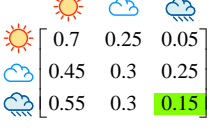
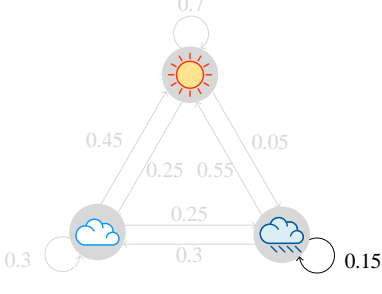
$$A = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.25 & 0.05 \\ 0.45 & 0.3 & 0.25 \\ 0.55 & 0.3 & 0.15 \end{bmatrix} \quad (1)$$

⚠ 注意，这个邻接矩阵的每一行之和为 1；每一行表示从当前节点出发，跳到其他节点的概率分布。

表 1. 邻接矩阵 A 每个元素的含义

转换	邻接矩阵 A 元素	有向边
晴天 → 晴天 (70%)	$\begin{bmatrix} 0.7 & 0.25 & 0.05 \\ 0.45 & 0.3 & 0.25 \\ 0.55 & 0.3 & 0.15 \end{bmatrix}$	

晴天 → 阴天 (25%)		
晴天 → 雨天 (5%)		
阴天 → 晴天 (45%)		
阴天 → 阴天 (30%)		
阴天 → 雨天 (25%)		

雨天 → 晴天 (55%)		
雨天 → 阴天 (30%)		
雨天 → 雨天 (15%)		

天气状态转换

如果当前的天气为晴天，对应行向量 $[1 \ 0 \ 0]$ ，下一天各种天气状态概率可以通过以下矩阵乘法得到

$$[1 \ 0 \ 0] @ A = [1 \ 0 \ 0] @ \begin{bmatrix} 0.7 & 0.25 & 0.05 \\ 0.45 & 0.3 & 0.25 \\ 0.55 & 0.3 & 0.15 \end{bmatrix} = [0.7 \ 0.25 \ 0.05] \quad (2)$$

上述乘法相当于提取邻接矩阵 A 的第一行。

类似地，如果当前的天气为阴天，对应 $[0 \ 1 \ 0]$ ，下一天各种天气状态概率可以通过以下矩阵乘法得到

$$[0 \ 1 \ 0] @ A = [0 \ 1 \ 0] @ \begin{bmatrix} 0.7 & 0.25 & 0.05 \\ 0.45 & 0.3 & 0.25 \\ 0.55 & 0.3 & 0.15 \end{bmatrix} = [0.45 \ 0.3 \ 0.25] \quad (3)$$

同理，下式代表当前雨天 $[0 \ 0 \ 1]$ 时，下一天各种天气状态的概率

$$[0 \ 0 \ 1] @ A = [0 \ 0 \ 1] @ \begin{bmatrix} 0.7 & 0.25 & 0.05 \\ 0.45 & 0.3 & 0.25 \\ 0.55 & 0.3 & 0.15 \end{bmatrix} = [0.55 \ 0.3 \ 0.15] \quad (4)$$

转移矩阵

(2)、(3)、(4) 三个式子显然不是我们常见的矩阵乘法形式，它们转置之后就变成了我们熟悉的样式。

比如，转置之后得到 (2)

$$\mathbf{A}^T @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.45 & 0.55 \\ 0.25 & 0.3 & 0.3 \\ 0.05 & 0.25 & 0.15 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 \\ 0.25 \\ 0.05 \end{bmatrix} \quad (5)$$

我们给邻接矩阵的转置 \mathbf{A}^T 一个名字——转移矩阵 (transition matrix, left stochastic matrix, Markov matrix) \mathbf{T} ，即

$$\mathbf{T} = \mathbf{A}^T = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.45 & 0.55 \\ 0.25 & 0.3 & 0.3 \\ 0.05 & 0.25 & 0.15 \end{bmatrix} \quad (6)$$

这样，转移矩阵 \mathbf{T} 的每一列之和为 1。

⚠ 注意，一些文献资料用 (6) 的转置（每一行元素之和为 1）作为转移矩阵，这种转移矩阵叫 right stochastic matrix；状态向量为行向量，矩阵乘法需要转置。

用状态向量 (state vector) \mathbf{x}_i 表示当前天气， \mathbf{x}_{i+1} 表示下一天天气。

⚠ 注意，状态向量 \mathbf{x} 的元素之和为 1。

如图 2 所示，当前为晴天，下一天各种天气状态的概率，可以写成矩阵乘法

$$\mathbf{T} @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.45 & 0.55 \\ 0.25 & 0.3 & 0.3 \\ 0.05 & 0.25 & 0.15 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 \\ 0.25 \\ 0.05 \end{bmatrix} \quad (7)$$

上式相当于提取了转移矩阵 \mathbf{T} 的第一列。

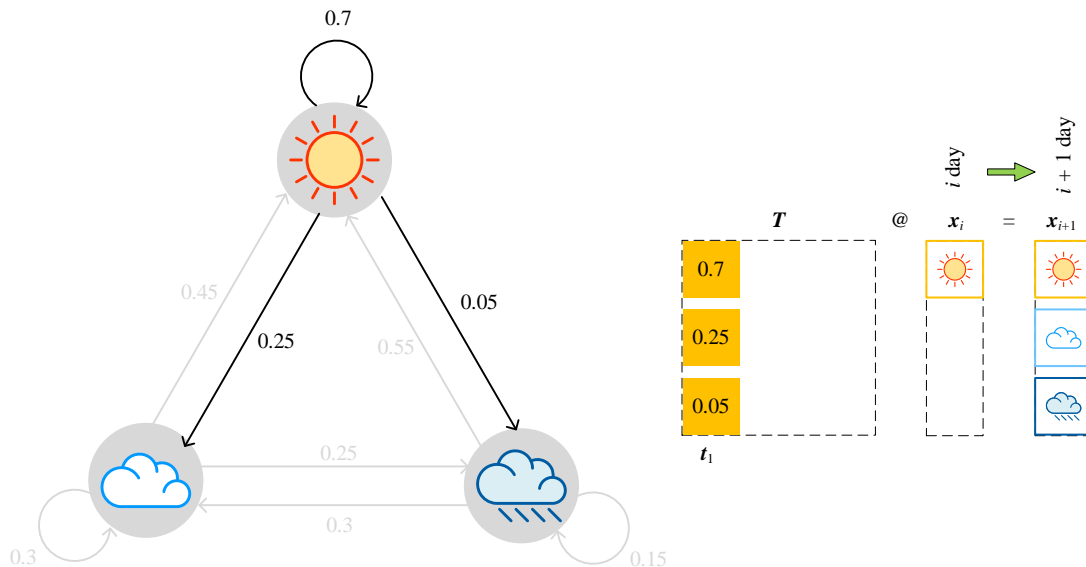


图 2. 上一天为晴天，转换为第二天天气状态

如图 3 所示，当前为阴天，下一天各种天气状态的概率，可以写成矩阵乘法

$$\mathbf{T} @ \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.45 & 0.55 \\ 0.25 & 0.3 & 0.3 \\ 0.05 & 0.25 & 0.15 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.45 \\ 0.3 \\ 0.25 \end{bmatrix} \quad (8)$$

上式相当于提取了转移矩阵 \mathbf{T} 的第二列。

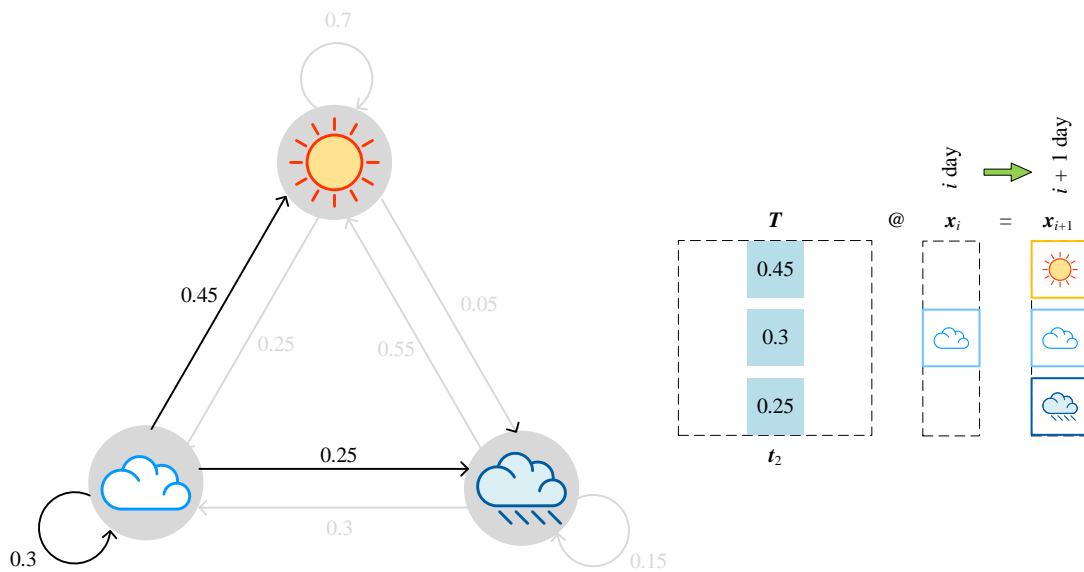


图 3. 上一天为阴天，转换为第二天天气状态

如图 4 所示，当前为雨天，下一天各种天气状态的概率，可以写成矩阵乘法

$$\mathbf{T} @ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.45 & 0.55 \\ 0.25 & 0.3 & 0.3 \\ 0.05 & 0.25 & 0.15 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.55 \\ 0.3 \\ 0.15 \end{bmatrix} \quad (9)$$

上式相当于提取了转移矩阵 \mathbf{T} 的第三列。

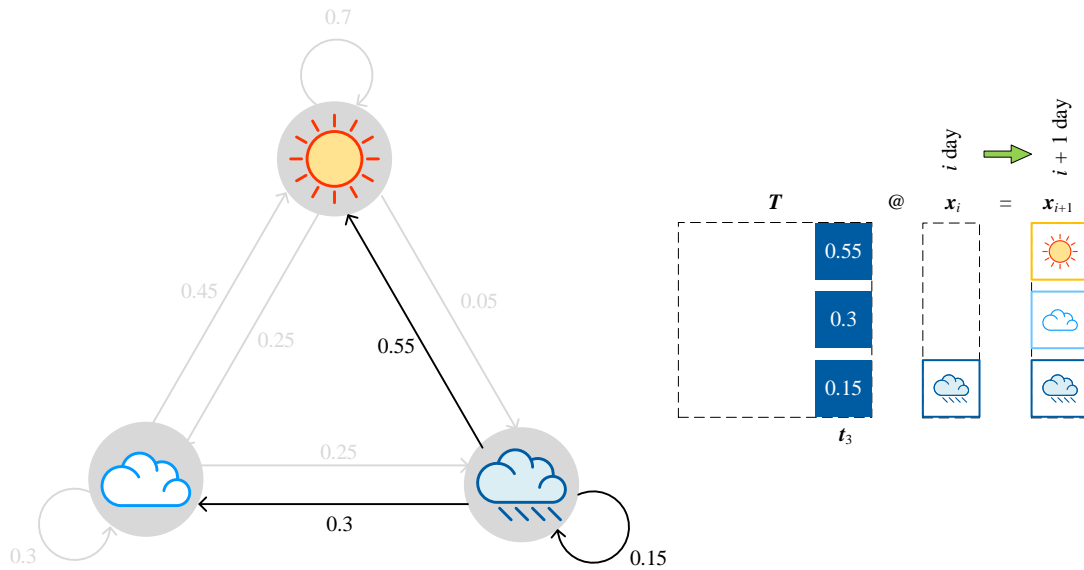


图 4. 上一天为雨天，转换为第二天天气状态

如图 5 所示，转移矩阵 T 、当前天气状态 x_i 和下一天天气状态 x_{i+1} 三者关系如下

$$x_{i+1} = Tx_i \quad (10)$$

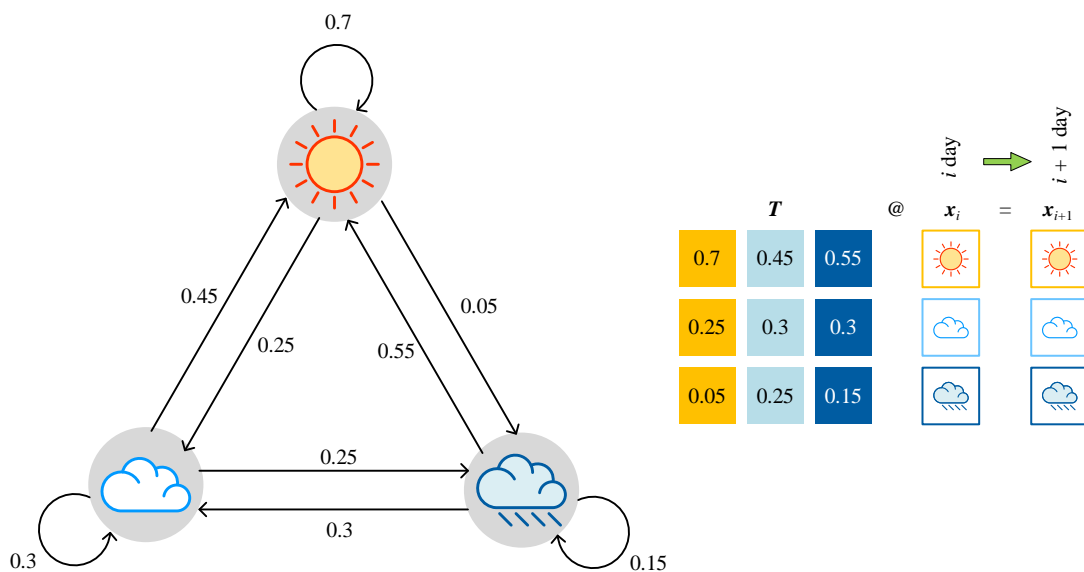


图 5. 天气状态有向图的转移矩阵

转移矩阵行向量

从行向量角度看转换矩阵 T ，我们可以得到图 6、图 7 和图 8 三幅图像。

图 6 所示为当前三种天气状态转换成下一天晴天概率的运算。

请大家自行分析图 7、图 8。

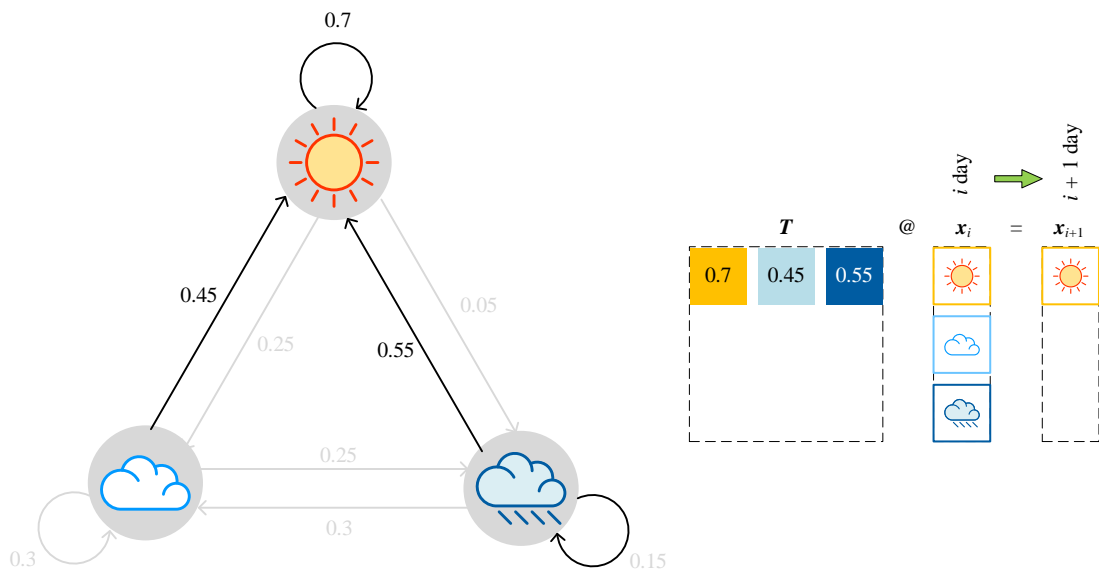


图 6. 当前三种天气状态转换成下一天晴天的运算

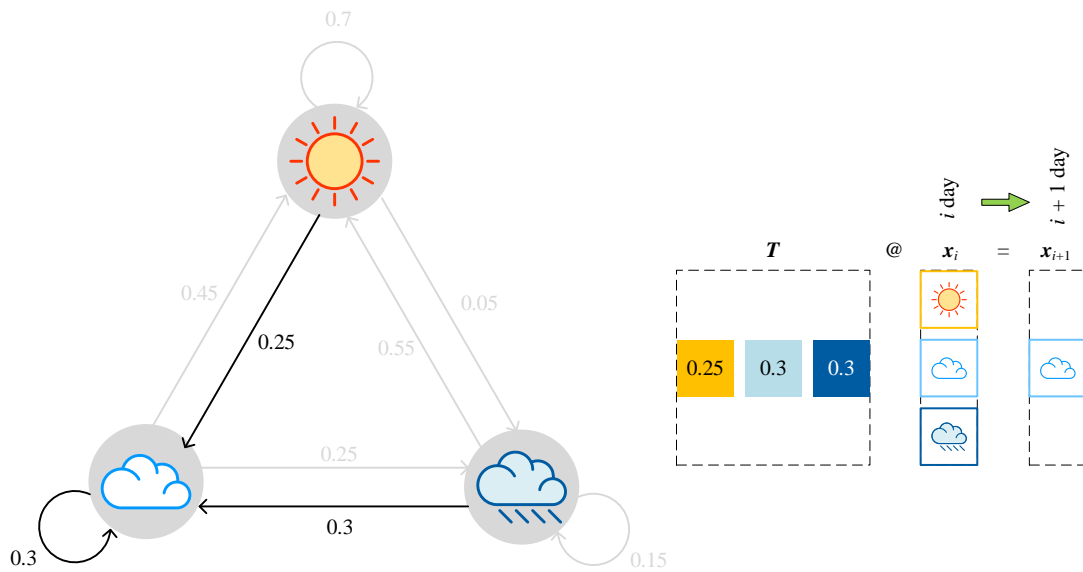


图 7. 当前三种天气状态转换成下一天阴天的运算

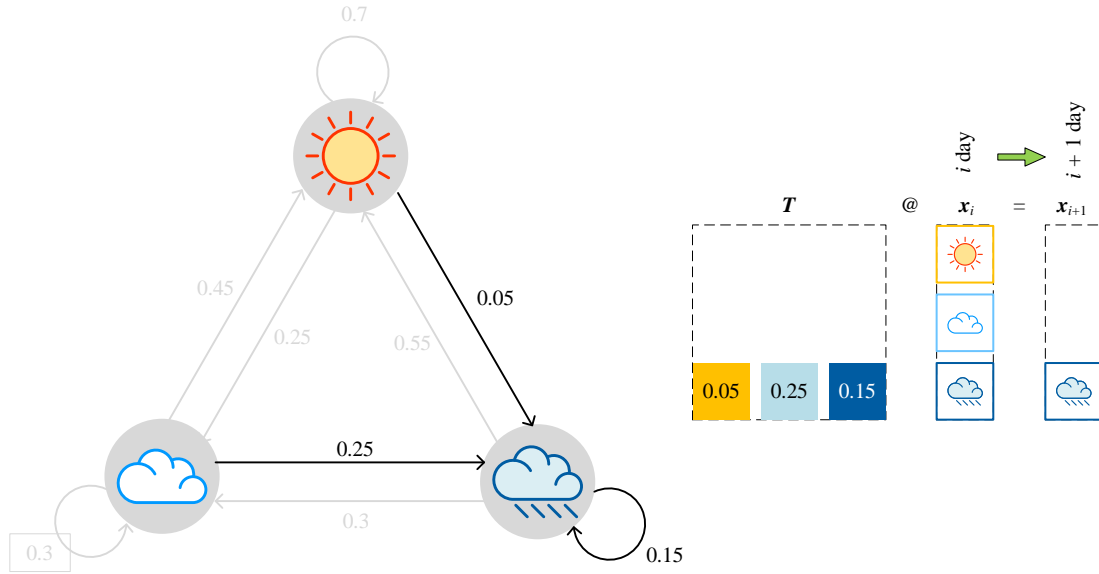


图 8. 当前三种天气状态转换成下一天雨天的运算

稳态

如果当前天气状况为晴天，经过 1 天后，天气的状态向量为

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{T} @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.45 & 0.55 \\ 0.25 & 0.3 & 0.3 \\ 0.05 & 0.25 & 0.15 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 \\ 0.25 \\ 0.05 \end{bmatrix} \quad (11)$$

经过 2 天后，天气状态为

$$\mathbf{x}_{i+2} = \mathbf{T} @ \mathbf{x}_{i+1} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.45 & 0.55 \\ 0.25 & 0.3 & 0.3 \\ 0.05 & 0.25 & 0.15 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 0.7 \\ 0.25 \\ 0.05 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.63 \\ 0.265 \\ 0.105 \end{bmatrix} \quad (12)$$

经过 3 天后，天气状态为

$$\mathbf{x}_{i+3} = \mathbf{T} @ \mathbf{x}_{i+2} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.45 & 0.55 \\ 0.25 & 0.3 & 0.3 \\ 0.05 & 0.25 & 0.15 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 0.63 \\ 0.265 \\ 0.105 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.618 \\ 0.2685 \\ 0.1135 \end{bmatrix} \quad (13)$$

经过 4 天后，天气状态为

$$\mathbf{x}_{i+3} = \mathbf{T} @ \mathbf{x}_{i+2} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.45 & 0.55 \\ 0.25 & 0.3 & 0.3 \\ 0.05 & 0.25 & 0.15 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 0.618 \\ 0.2685 \\ 0.1135 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.61585 \\ 0.2691 \\ 0.11505 \end{bmatrix} \quad (14)$$

经过 4 天后，天气状态为

$$\mathbf{x}_{i+3} = \mathbf{T} @ \mathbf{x}_{i+2} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.45 & 0.55 \\ 0.25 & 0.3 & 0.3 \\ 0.05 & 0.25 & 0.15 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 0.61585 \\ 0.2691 \\ 0.11505 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.6154675 \\ 0.2692075 \\ 0.115325 \end{bmatrix} \quad (15)$$

如图 9 所示，经过若干天后，天气状态向量 \mathbf{x} 似乎趋于稳定，即

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

$$\mathbf{x} = T\mathbf{x} \quad (16)$$

上式告诉我们，转移矩阵存在一个特征值为 1，对应的特征向量就是上式中的 \mathbf{x} ——一种稳定状态。我们管这个 \mathbf{x} 叫做稳态 (steady state, stationary probability vector)。

? 请大家自行分析图 10、图 11。

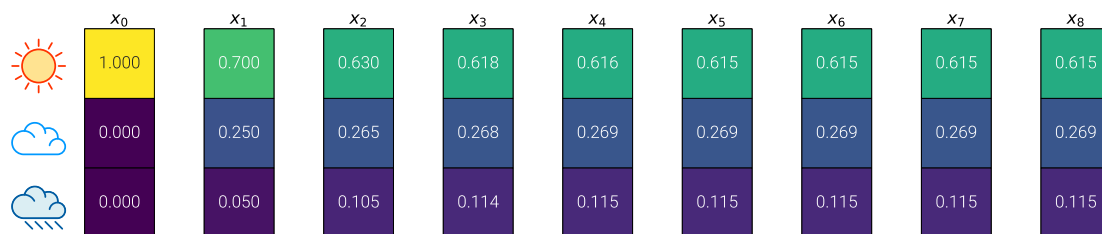


图 9. 从晴天经过转移矩阵变换得到的稳态

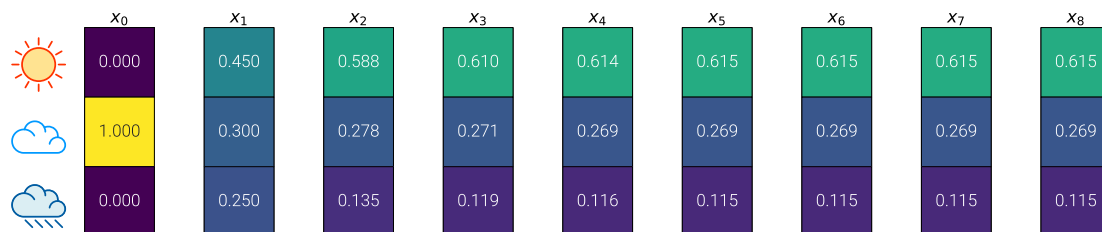


图 10. 从阴天经过转移矩阵变换得到的稳态

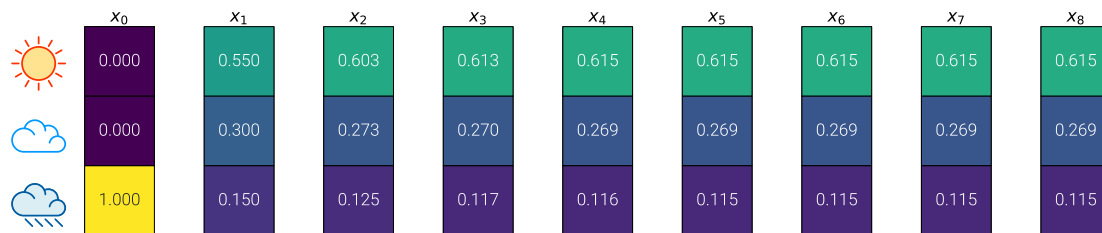


图 11. 从雨天经过转移矩阵变换得到的稳态

这个特别像上一节的传球问题。只不过问题从路径变成了概率值，而且每个节点增加了自环。

特征值分解

对转移矩阵 T 特征值分解

$$T = \underbrace{\begin{bmatrix} -0.902 & -0.791 & -0.289 \\ -0.395 & 0.222 & -0.516 \\ -0.169 & 0.569 & 0.805 \end{bmatrix}}_V \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & \\ & 0.178 & \\ & & -0.028 \end{bmatrix}}_A \underbrace{\begin{bmatrix} -0.681 & -0.681 & -0.681 \\ -0.584 & 1.119 & 0.506 \\ 0.269 & -0.933 & 0.739 \end{bmatrix}}_{V^{-1}} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.45 & 0.55 \\ 0.25 & 0.3 & 0.3 \\ 0.05 & 0.25 & 0.15 \end{bmatrix} \quad (17)$$

上式仅保留小数点后三位数字。

特征值为 1 对应的特征向量为

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} -0.902 \\ -0.395 \\ -0.169 \end{bmatrix} \quad (18)$$

由于稳态向量元素均为整数，且元素之和为 1，对上述特征向量调整得到

$$\mathbf{x}_{\text{steady}} = \begin{bmatrix} 0.615 \\ 0.269 \\ 0.115 \end{bmatrix} \quad (19)$$

结果仅保留三位小数。

⚠ 注意向量单位化不同于向量归一化。向量单位化之后，向量的 L2 范数为 1；向量归一化后，向量元素之和为 1。

这意味着，不管今天晴天、阴天、雨天的概率如何，过了一段时间之后，不管今天是什么天气，天气概率都趋向一个固定比例。



请大家用 DeepSeek/ChatGPT 等工具完成本节如下习题。

Q1. 请计算如下转移矩阵的特征值分解，并计算稳态向量。

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.2 \\ 0.3 & 0.8 \end{bmatrix}$$

Q2. 给定不同初始状态向量如下，以 **Q1** 转移矩阵完成线性变换，请分别计算这些状态分别迭代 10 次之后的状态向量

▶ $\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$

▶ $\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$

▶ $\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}$

Q3. 请用 NetworkX 构造、并可视化图 1 这幅有向图，编程计算其邻接矩阵、度矩阵。