

20

Transition Matrix

转移矩阵

图、线性代数、概率统计、马尔科夫链的合体



人，生而自由；但枷锁无处不在。

Man was born free, and he is everywhere in chains

—— 让-雅克·卢梭 (Jean-Jacques Rousseau) | 法国思想家卢梭 | 1856 ~ 1943



- networkx.adjacency_matrix() 将图转化为邻接矩阵
- networkx.DiGraph() 创建一个空的有向图
- networkx.from_numpy_array() 从 NumPy 数组创建图，数组视为邻接矩阵
- networkx.Graph() 创建一个空的无向图
- networkx.relabel_nodes() 改变图中节点的标签
- numpy.cumsum() 计算给定数组的累积和
- numpy.linalg.eig() 特征值分解
- numpy.matrix() 构造矩阵
- numpy.random.choice() 从给定的一维数组中随机采样
- seaborn.heatmap() 绘制热图

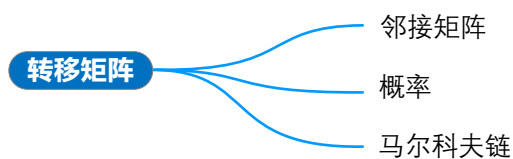
本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

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



20.1 再看邻接矩阵

图 1 所示为连接六个城市的路线图，一个人徒步从 a 城市出发前往 f 城市。

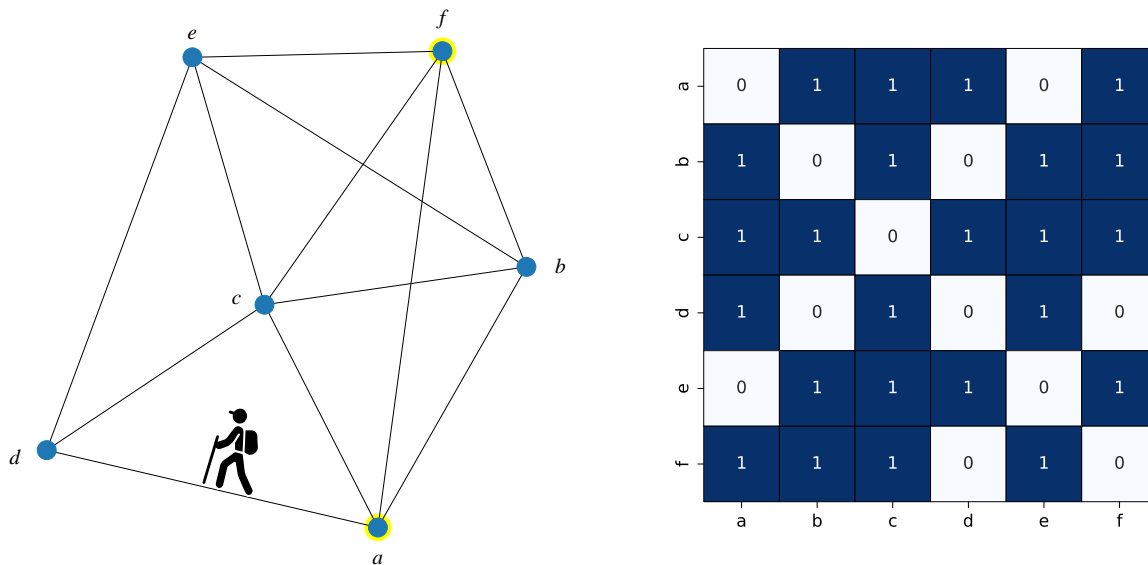


图 1. 连接六个城市的路线图，无向图和邻接矩阵

无向图

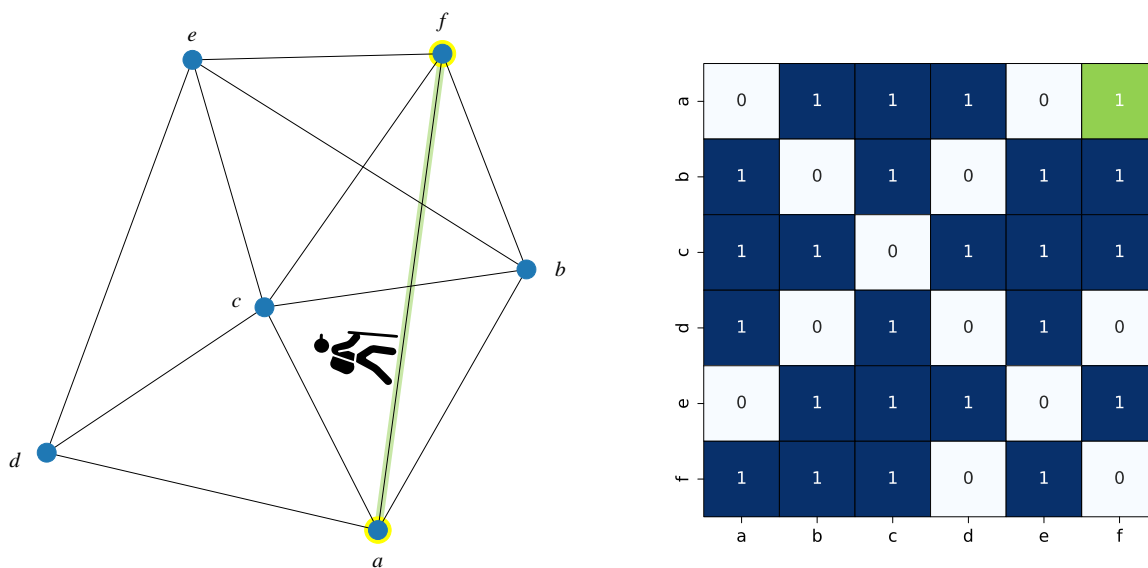
图 1 显然可以看做无向图，且边无权重。将其转化为邻接矩阵

$$A = \begin{matrix} & \begin{matrix} a & b & c & d & e & f \end{matrix} \\ \begin{matrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \\ f \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (1)$$

直达

如图 2，从 a 直达 f 只有一条路；直达表示不途径任何一座城市。

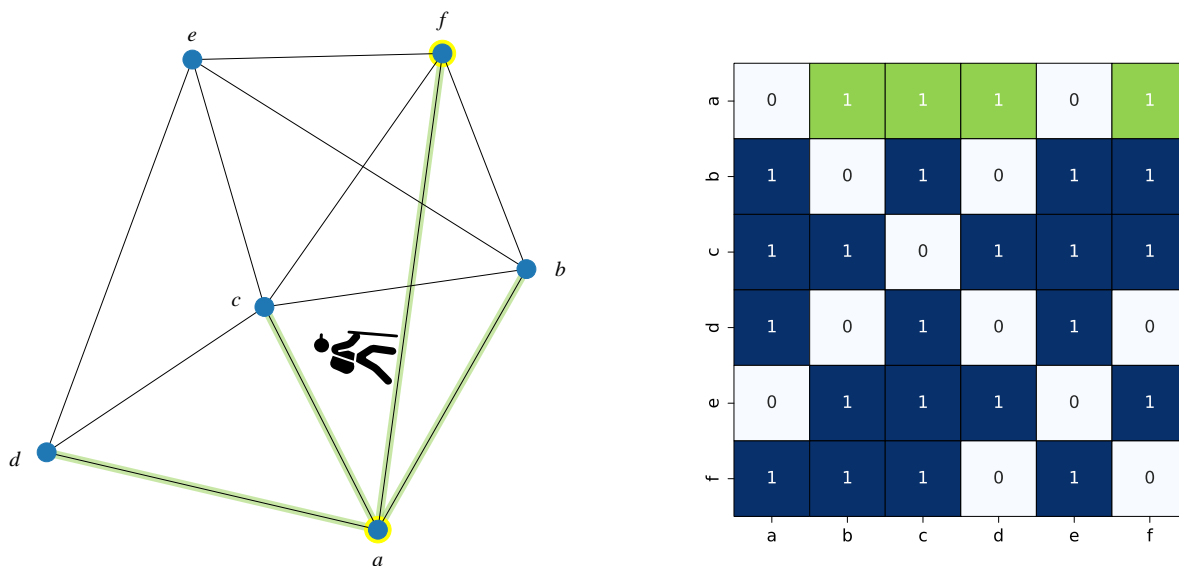
在邻接矩阵中，我们可以看到 $a_{6,1} = a_{1,6} = 1$ 。

图 2. 无向图，从 a 直达 f 只有一条路

类似本书前文的“传球问题”，我们可以很容易利用矩阵乘法理解上述结果。比如下式告诉我们从 a 出发，直达的城市有哪些

$$A @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2)$$

如图 3 所示，从 a 出发直达城市有 4 个—— b 、 c 、 d 、 f 。

图 3. 从 a 出发直达城市有 4 个，无向图的邻接矩阵行向量角度来看

由于邻接矩阵为对称矩阵，我们可以从邻接矩阵列向量角度看，结论一致。对应的矩阵乘法

$$[1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0] @ A = [1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0] @ \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = [0 \ 1 \ 1 \ 1 \ 0 \ 1] \quad (3)$$

再次强调，无向图的邻接矩阵为对称矩阵，才存在上述两个视角；而有向图的邻接矩阵一般都不是对称矩阵，这需要大家格外注意。

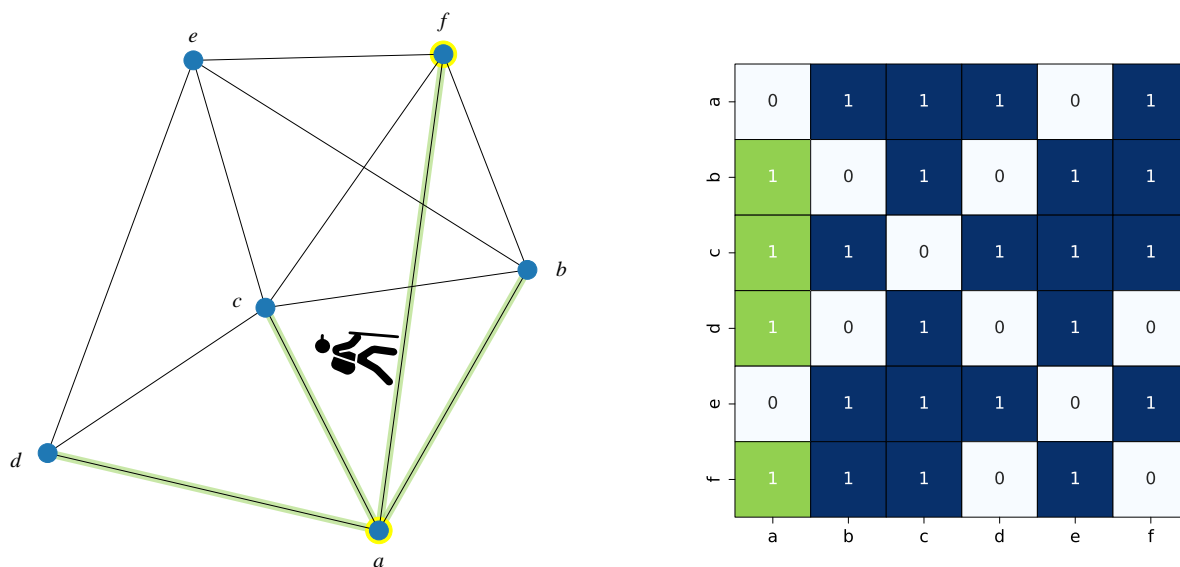


图 4. 从 a 出发直达城市有 4 个，无向图的邻接矩阵列向量角度来看

途径一座城

从 a 到 f ，要知道中间途径一座城市有几种走法，可以通过计算 A^2 得到：

$$A @ A = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 3 & 1 & 4 & 2 \\ 2 & 4 & 3 & 3 & 2 & 3 \\ 3 & 3 & 5 & 2 & 3 & 3 \\ 1 & 3 & 2 & 3 & 1 & 3 \\ 4 & 2 & 3 & 1 & 4 & 2 \\ 2 & 3 & 3 & 3 & 2 & 4 \end{bmatrix} \quad (4)$$

A^2 显然也是对称矩阵。

如图 5 所示，中间途径一座城市有两种走法。用如下矩阵乘法很容解释结果

$$A @ A @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \\ 3 \\ 1 \\ 4 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (5)$$

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

下面让我们再看看 A^2 矩阵中第 1 行第 1 列元素 $a_{1,1} = 4$ ，它代表从 a 出发经过一座城市，再回到 a 的路径数量为 4，即 aba 、 aca 、 ada 、 afa 。

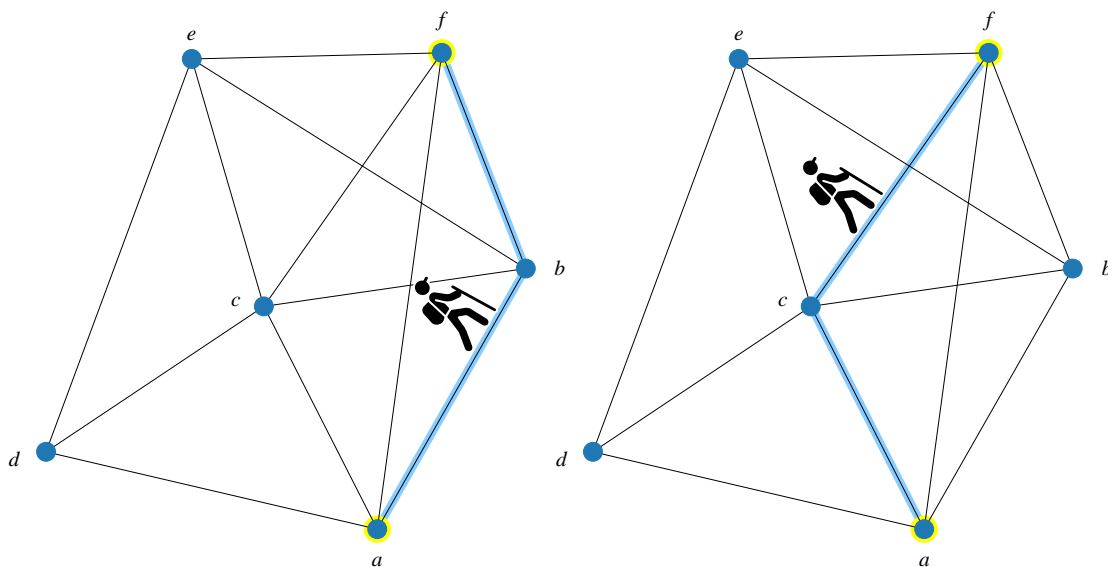


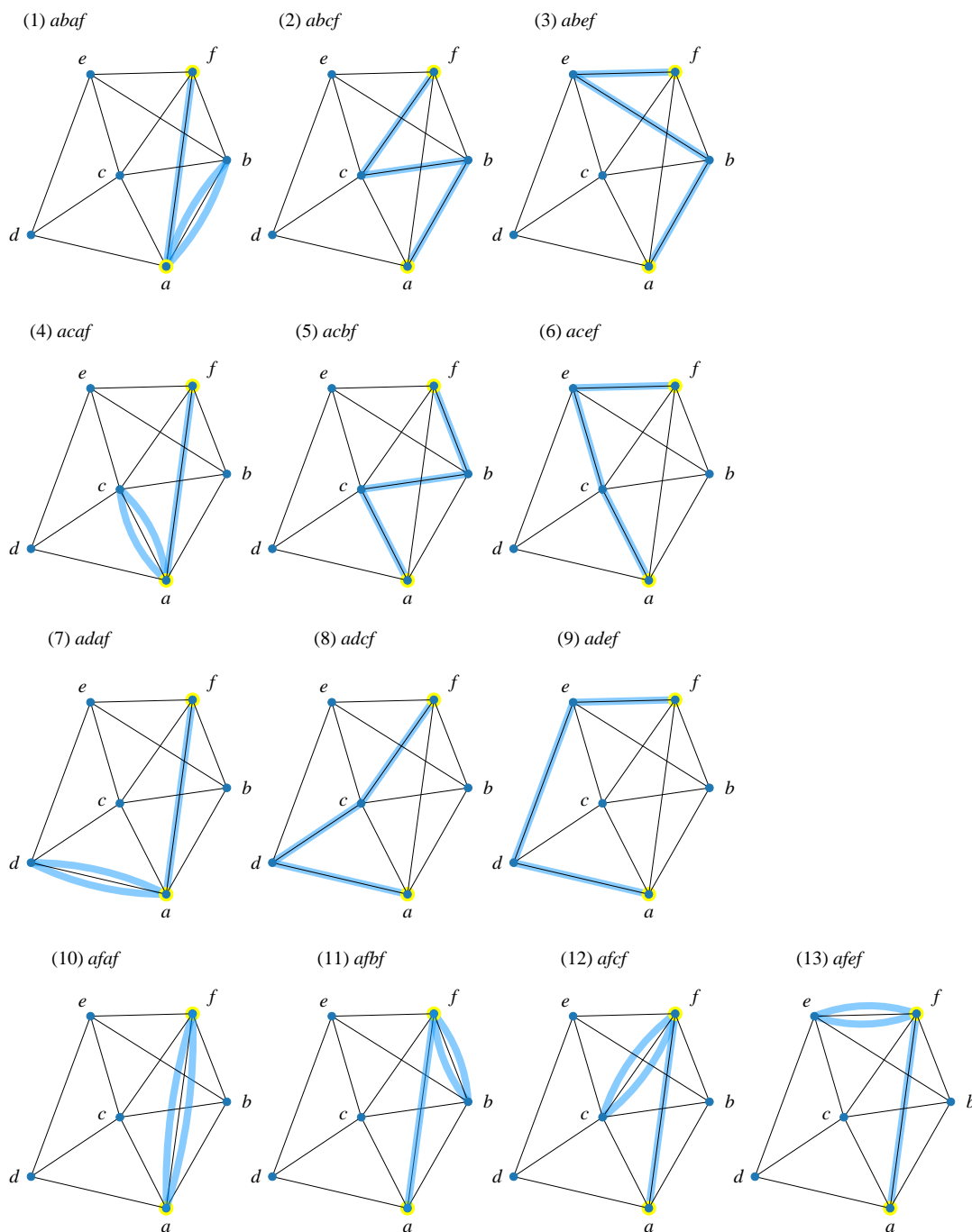
图 5. 从 a 到 f 中间途径一座城市

途径两座城市

从 a 到 f ，要知道中间途径两座城市有几种走法，可以通过计算 A^3 得到：

$$A @ A @ A = \begin{bmatrix} 8 & 13 & 13 & 11 & 8 & 13 \\ 13 & 10 & 14 & 7 & 13 & 11 \\ 13 & 14 & 14 & 11 & 13 & 14 \\ 11 & 7 & 11 & 4 & 11 & 7 \\ 8 & 13 & 13 & 11 & 8 & 13 \\ 13 & 11 & 14 & 7 & 13 & 10 \end{bmatrix} \quad (6)$$

上述结果 ($a_{6,1} = a_{1,6} = 13$) 告诉我们竟然有 13 条走法。我们把它一一画出来，具体如图 6 所示。

图 6. 从 a 到 f 中间途径两座城市

途径不超过两座城市

如果要计算，从 a 到 f 途径不超过两座城市的路径数量，我们可以利用如下矩阵运算

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A} + \mathbf{A} @ \mathbf{A} + \mathbf{A} @ \mathbf{A} @ \mathbf{A} &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 4 & 2 & 3 & 1 & 4 & 2 \\ 2 & 4 & 3 & 3 & 2 & 3 \\ 3 & 3 & 5 & 2 & 3 & 3 \\ 1 & 3 & 2 & 3 & 1 & 3 \\ 4 & 2 & 3 & 1 & 4 & 2 \\ 2 & 3 & 3 & 3 & 2 & 4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 8 & 13 & 13 & 11 & 8 & 13 \\ 13 & 10 & 14 & 7 & 13 & 11 \\ 13 & 14 & 14 & 11 & 13 & 14 \\ 11 & 7 & 11 & 4 & 11 & 7 \\ 8 & 13 & 13 & 11 & 8 & 13 \\ 13 & 11 & 14 & 7 & 13 & 10 \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} 12 & 16 & 17 & 13 & 12 & 16 \\ 16 & 14 & 18 & 10 & 16 & 15 \\ 17 & 18 & 19 & 14 & 17 & 18 \\ 13 & 10 & 14 & 7 & 13 & 10 \\ 12 & 16 & 17 & 13 & 12 & 16 \\ 16 & 15 & 18 & 10 & 16 & 14 \end{bmatrix} \quad (7)
 \end{aligned}$$

这实际上是把本章前文的几种情况放在一起考虑。

Bk6_Ch20_01.ipynb 完成本节所有矩阵运算，请大家自行学习。

20.2 转移矩阵：可能性

下面，我们把本章前文问题稍作修改。从 a 出发，到达 b 、 c 、 d 、 f 的可能性相同，均为 $1/4$ 。这相当于 (1) 中邻接矩阵 \mathbf{A} 的第 1 列元素分别处以该列元素之和。类似地，从 b 出发，到达 a 、 c 、 e 、 f 的可能也相同，均为 $1/4$ 。

请大家务必注意，这个无向图的邻接矩阵为对称矩阵；对称矩阵的转置为本身。

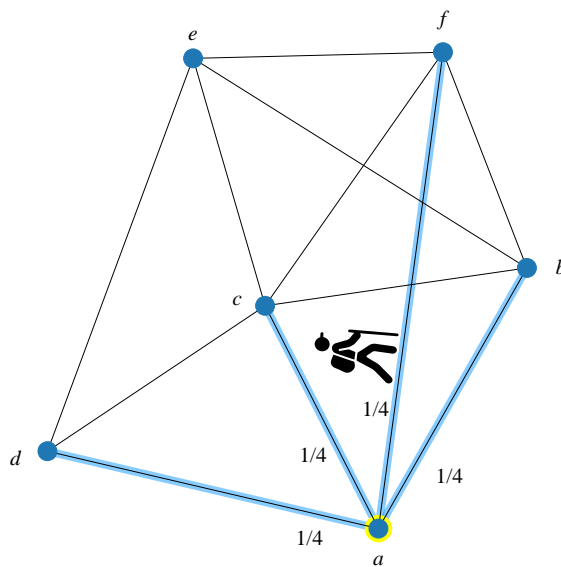


图 7. 从 a 出发到达 b 、 c 、 d 、 f 的可能性均为 $1/4$

这样我们便得到如下矩阵

$$T = \begin{bmatrix} 0 & 1/4 & 1/5 & 1/3 & 0 & 1/4 \\ 1/4 & 0 & 1/5 & 0 & 1/4 & 1/4 \\ 1/4 & 1/4 & 0 & 1/3 & 1/4 & 1/4 \\ 1/4 & 0 & 1/5 & 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 1/4 & 1/5 & 1/3 & 0 & 1/4 \\ 1/4 & 1/4 & 1/5 & 0 & 1/4 & 0 \end{bmatrix} \quad (8)$$

这个矩阵的每列元素和都是 1。

这是否让大家想到了**转移矩阵** (transition matrix)? 这样我们便建立了 (无向图) 邻接矩阵和转移矩阵的直接联系。

从 a 出发, 到达其他城市的可能性可以通过如下乘法得到结果:

$$T @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1/4 & 1/5 & 1/3 & 0 & 1/4 \\ 1/4 & 0 & 1/5 & 0 & 1/4 & 1/4 \\ 1/4 & 1/4 & 0 & 1/3 & 1/4 & 1/4 \\ 1/4 & 0 & 1/5 & 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 1/4 & 1/5 & 1/3 & 0 & 1/4 \\ 1/4 & 1/4 & 1/5 & 0 & 1/4 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \\ 0 \\ 1/4 \end{bmatrix} \quad (9)$$

上式相当于取出了转移矩阵 T 的第 1 列。

(9) 转置得到

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} @ T_A^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 0 & 1/4 \\ 1/4 & 0 & 1/4 & 0 & 1/4 & 1/4 \\ 1/5 & 1/5 & 0 & 1/5 & 1/5 & 1/5 \\ 1/3 & 0 & 1/3 & 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 0 & 1/4 \\ 1/4 & 1/4 & 1/4 & 0 & 1/4 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 0 & 1/4 \end{bmatrix} \quad (10)$$

T 转置矩阵的每行元素求和为 1, 上式相当于取出 T 转置的第 1 行。

注意, 有些文献中转移矩阵会采用 (10) 这种形式。

20.3 有向图

再看鸡兔互变

如图 8 所示, “鸡兔互变”也可以看做时一幅有向图, 有向边的权重便是概率值。

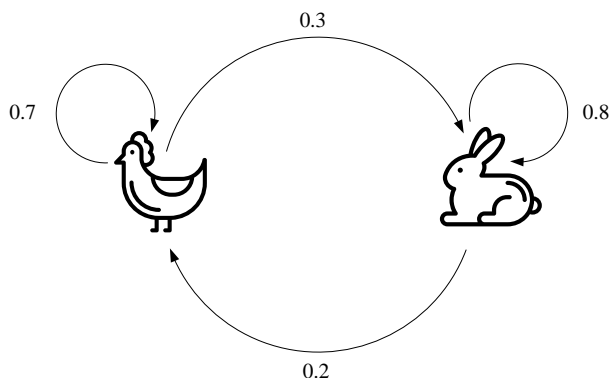


图 8. “鸡兔互变”的有向图

鸡兔互变的有向图对应的邻接矩阵为

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.3 \\ 0.2 & 0.8 \end{bmatrix} \quad (11)$$

值得注意的是，上述邻接矩阵的每行元素之和为 1。

而《数学要素》常用的转移矩阵形式为：

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.2 \\ 0.3 & 0.8 \end{bmatrix} \quad (12)$$

我们发现 (11) 这个邻接矩阵是我们常用的转移矩阵的转置，即 $\mathbf{A} = \mathbf{T}^T$ 。

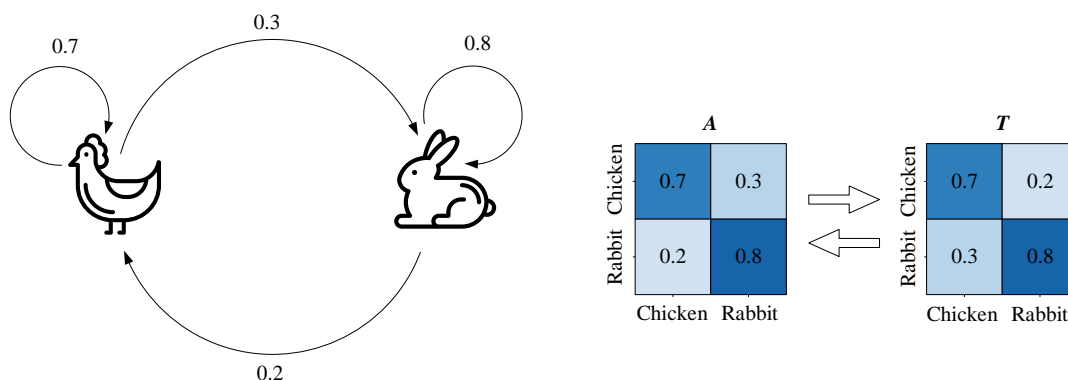


图 9. “鸡兔互变”的有向图，邻接矩阵、转移矩阵关系

如果采用 (11) 邻接矩阵这种形式，现在是一只鸡，鸡兔互变对应的矩阵乘法为

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} 0.7 & 0.3 \\ 0.2 & 0.8 \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.3 \end{bmatrix} \quad (13)$$

图 10 所示为上式的示意图。

这相当于取出邻接矩阵的第 1 行。

如果采用 (12) 转移矩阵这种形式，上式可以写成

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 0.7 & 0.2 \\ 0.3 & 0.8 \end{bmatrix}}_{\mathbf{T}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 \\ 0.3 \end{bmatrix} \quad (14)$$

这相当于取出转移矩阵的第 1 列。

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

而 (13) 和 (14) 为转置关系。实际上，一些参考文献也会采用 (13) 这种转移矩阵形式。

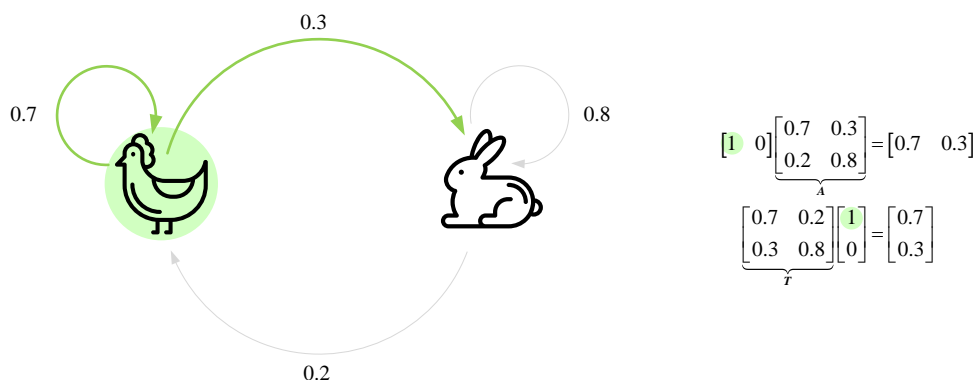


图 10. 当前状态是一只鸡

如果采用 (11) 邻接矩阵这种形式，现在是一只图，鸡兔互变对应的矩阵乘法为

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} 0.7 & 0.3 \\ 0.2 & 0.8 \end{bmatrix}}_A = \begin{bmatrix} 0.2 & 0.8 \end{bmatrix} \quad (15)$$

这相当于取出邻接矩阵的第 2 行。图 11 所示为上式的示意图。

如果采用 (12) 转移矩阵这种形式，上式可以写成

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 0.7 & 0.2 \\ 0.3 & 0.8 \end{bmatrix}}_T \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.2 \\ 0.8 \end{bmatrix} \quad (16)$$

这相当于取出转移矩阵的第 2 列。上两式的矩阵乘法互为转置。

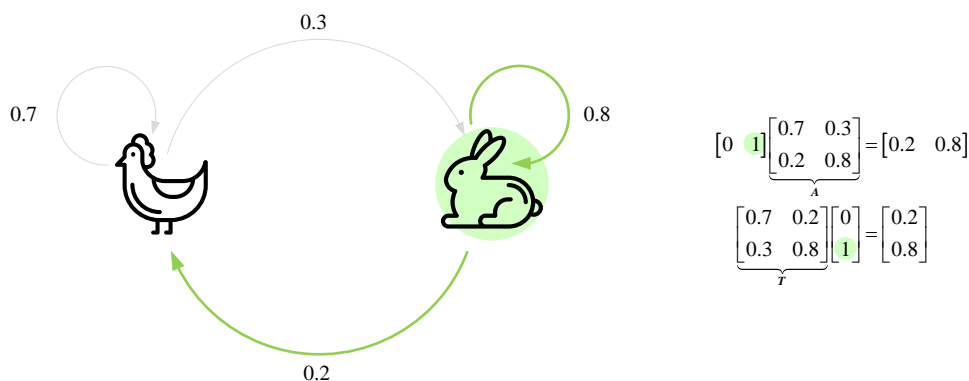


图 11. 当前状态是一只兔

航班

对前文的无向图的每条边增加方向，我们便得到图 12。

打个比方，图 1 的无向图中的无向边相当于双向车道，而图 12 的无向图相当于航班。

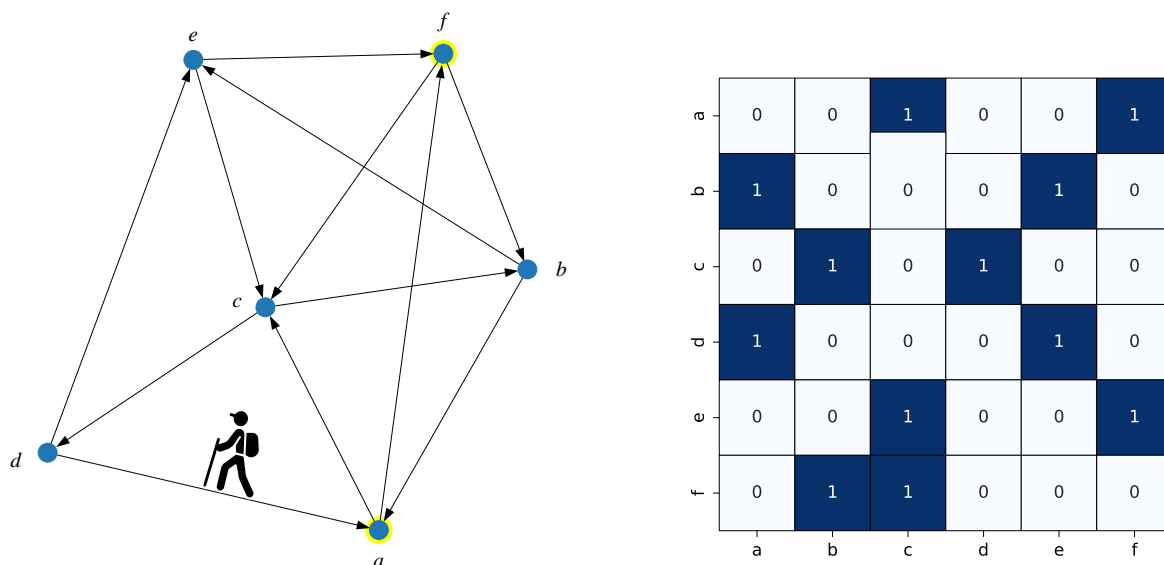


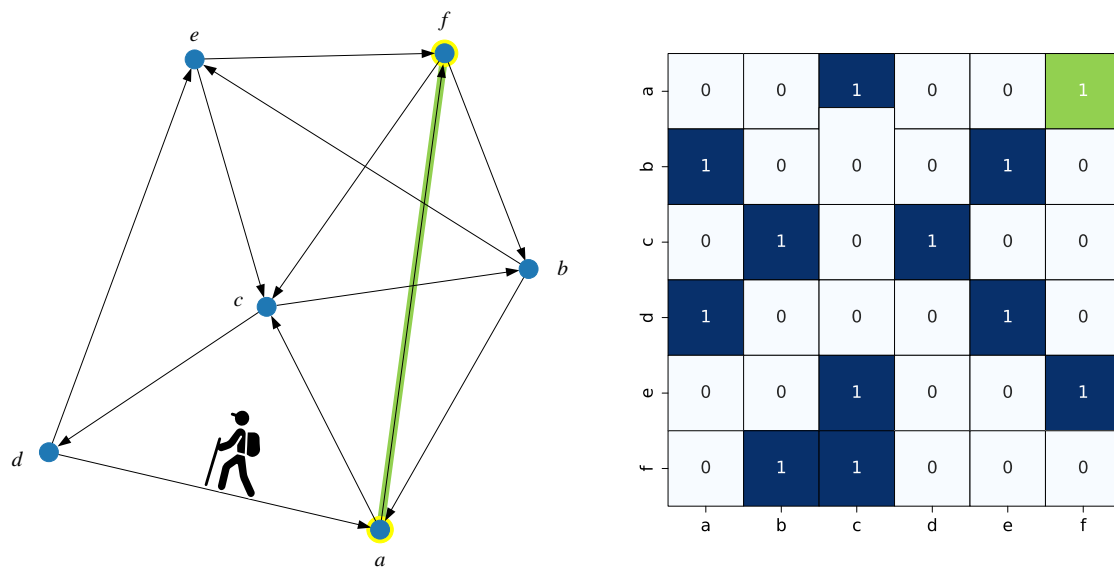
图 12. 连接六个城市的航班图，有向图

图 12 这个有向图的邻接矩阵为

$$A = \begin{matrix} & \begin{matrix} a & b & c & d & e & f \end{matrix} \\ \begin{matrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \\ f \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (17)$$

显然这个邻接矩阵不是对称矩阵。

还是看 a 、 f 这两个城市之间的“航班”，从邻接矩阵 A 中，我们知道存在直达航班。

图 13. 连接六个城市的航班图， a 、 f 存在直达航班

计算 (17) 中邻接矩阵的平方 A^2 ，结果为

$$A^2 = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (18)$$

看到 A^2 这个结果，我们可以得出结论不存在从 a 到 f 经停 1 站的航班线路。
下面假设，从任何城市出发去其他城市的乘坐航班的机会均等。

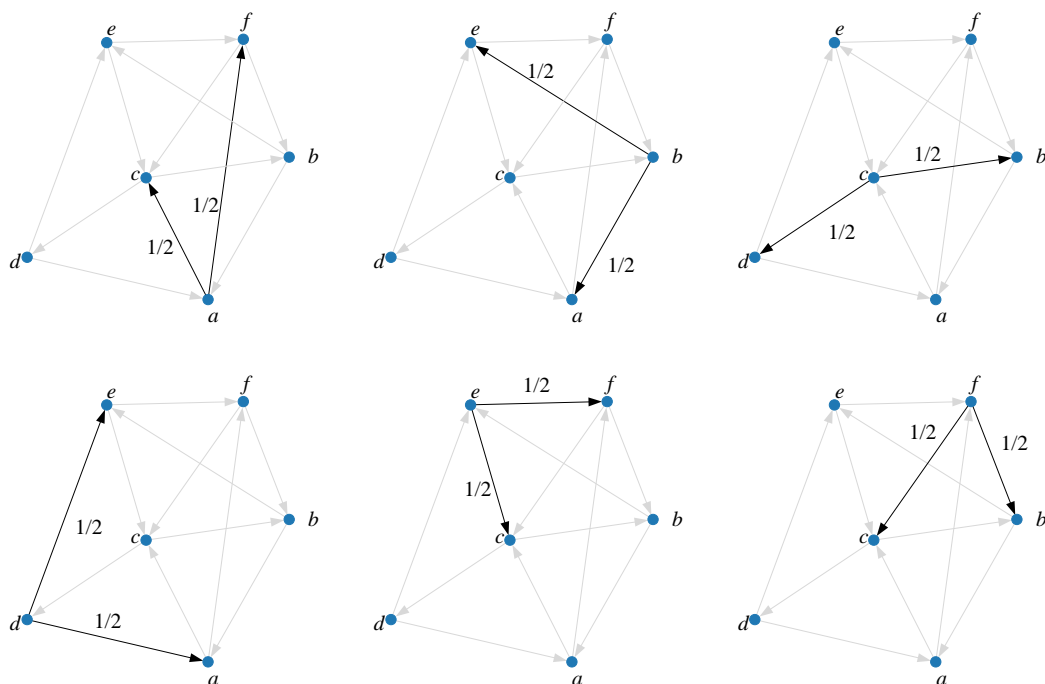


图 14. 从每个城市出发前往其他城市的概率均等

这样，我们得到有向图的邻接矩阵：

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (19)$$

每行元素之和为 1。

如图 15 所示，如果从节点 a 出发，有 $1/2$ 概率到达 c ，有 $1/2$ 概率到达 f ，对应如下矩阵乘法。

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \end{bmatrix} \quad (20)$$

将 (19) 转置便得到，转移矩阵的常用形式

$$\begin{bmatrix} 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \end{bmatrix} \quad (21)$$

还是从节点 a 出发，利用 (21) 转移矩阵，我们可以得到如下矩阵乘法

$$\begin{bmatrix} 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \\ 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{bmatrix} \quad (22)$$

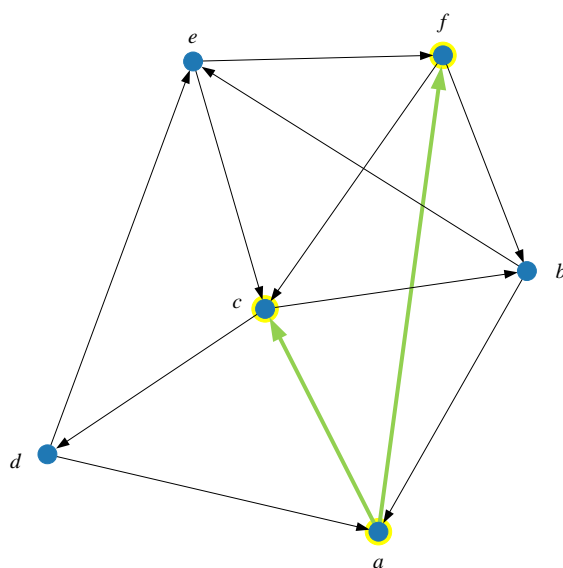


图 15. 连接六个城市的航班图，从节点 a 出发

20.3 马尔科夫链

有了转移矩阵，我们就可以聊聊马尔科夫过程。马尔可夫过程可以具备离散状态或者连续状态。具备离散状态的马尔可夫过程，通常被称为**马尔可夫链** (Markov chain)。

若 $X(t)$ 代表一个离散随机变量，那么马尔可夫链的表达式为：

$$\Pr(X_{n+1} = x | X_1 = x_1, X_2 = x_2, \dots, X_n = x_n) = \Pr(X_{n+1} = x | X_n = x_n) \quad (23)$$

(23) 这个式子很不好理解，下面还是以“鸡兔互变”为例来聊聊。

如图 16 所示，“鸡兔互变”这个马尔科夫链中具体概率值本质上是条件概率。

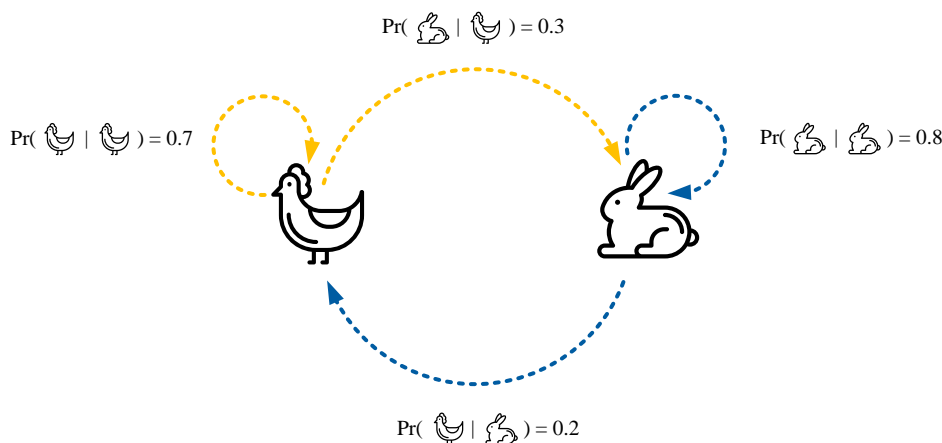


图 16. “鸡兔互变”中的条件概率

一只动物的 12 夜变化过程如图 17 所示；根据 (23)，马尔科夫过程描述具有“无记忆”性质的系统的状态转换过程。所谓“无记忆”性质，意味着系统的下一状态只依赖于当前状态（兔），而与之前的状态或是如何到达当前状态无关。这种“无记忆”性质也被称为马尔可夫性质。

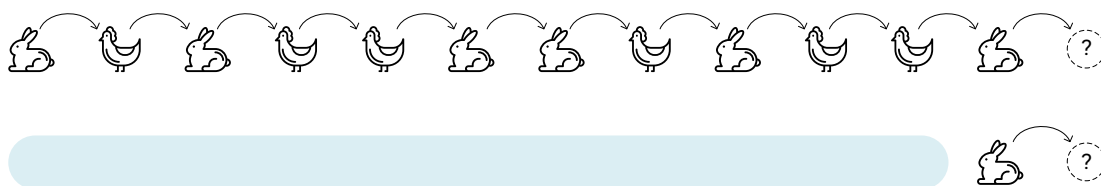


图 17. 一只动物 12 次变化

状态空间是马尔可夫链可能处于的所有状态的集合。例如，“鸡兔互变”的状态空间为 {鸡, 兔}。在一些情况下，随着时间的推移，系统到达每个状态的概率将达到一个固定的分布，这称为稳态分布或平稳分布。马尔可夫链可能不存在稳态分布，也可能存在多个稳态分布。只有具有**不可约** (irreducible)、**非周期** (aperiodic) 和**正常返** (positive recurrent) 性质的马尔可夫链才具有唯一的稳态分布。下面让我们分别介绍这三个概念。

不可约性

如果在状态空间中的任何两个状态之间都存在从一个状态到另一个状态的正概率路径，则称该马尔科夫链是不可约的。这意味着理论上从任何一个状态出发，都有可能经过一定的步数到达任何其他状态。

相反情况便是可约性。如果存在至少一个状态对，使得从一个状态到另一个状态的转移概率为零(即无法直接或间接到达)，则该链被称为可约的。

如果图中存在不相连的分量，比如图 18 (a) 这个图显然可约。

此外，如图 18 (b) 所示，状态到达 b 后，就在这个状态“自循环”，不能再回到 a 、 c 。因此，图 18 (b) 这个图也是可约。

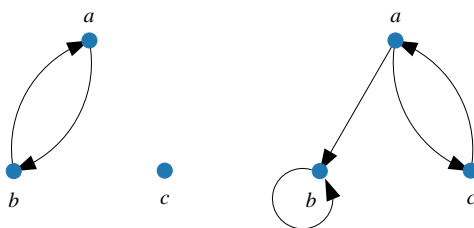


图 18 两个可约的有向图

不可约这个性质保证了无论我们从哪个状态开始，马尔可夫链都有可能探索到整个状态空间。如果一个马尔可夫链是可约的，那么它可能被分割成两个或更多彼此不可达的子集，这样就不能保证存在唯一的稳态分布，因为不同的子集可能有自己的稳态分布。

非周期性

一个状态是非周期的，如果从该状态出发，返回到该状态的步数不构成一个大于 1 的最大公约数。如果每个状态都是非周期的，则整个马尔科夫链是非周期的。这意味着从任何状态出发，返回到该状态的可能步数不会有固定的模式或周期。

非周期性确保了马尔可夫链不会陷入一个循环中，其中它只能在特定的时间步内访问某些状态。图 19 所示的图便具有特定的周期。

这个周期图展示了一个简单的闭环结构，其中包含三个节点，形成了一个周期。每个节点只能通过两步返回到自己，没有直接的自环，表明这个图的周期性。这个矩阵反映了周期图的特点：每个节点都通过恰好两步返回到自己，没有更短的路径，这表明每个节点的周期是 3。

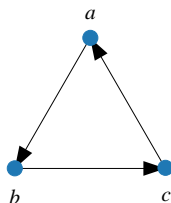


图 19 具有周期性的有向图

正常返

一个状态是正常返的，如果从该状态出发，预期返回到该状态的时间是有限的。更准确地说，如果状态 i 是正常返的，那么从 i 出发，返回到 i 的平均首次返回时间是有限的。

这意味着，长期来看，马尔可夫链将无限次返回到这个状态。正常返性质对于确保稳态分布的存在和唯一性至关重要。如图 20 所示，从节点 a 出发，如果到了 d ，则无法再返回 a 。如果从该状态出发，返回到该状态的概率小于 1，则称该状态为暂态 (transient)。

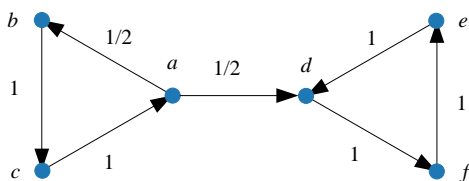


图 20 具有周期性的有向图

不可约性、正常返这两个性质似乎有些相似，下面聊聊两者的异同。

不可约性是关于马尔可夫链的状态空间的全局属性，强调的是状态之间的可达性。如果一个链是不可约的，那么理论上从任何一个状态出发，都可以通过一系列转移到达任何其他状态。

正常返则是关于单个状态的行为，特别是关于长期访问该状态的频率。一个状态是正常返的，意味着长期来看，它会被反复访问，且平均每次访问之间的时间间隔是有限的。

三个天气状态

如图 21 所示，某一个地区的天气只有三种状态——晴天、阴天和雨天，即可能输出状态有限。图 21 描述了下一天天气状态和上一天天气状态之间的概率关系，这幅图显然可以看做是有向图；请大家用 NetworkX 构造这幅图的有向图，并且产生其有向图。

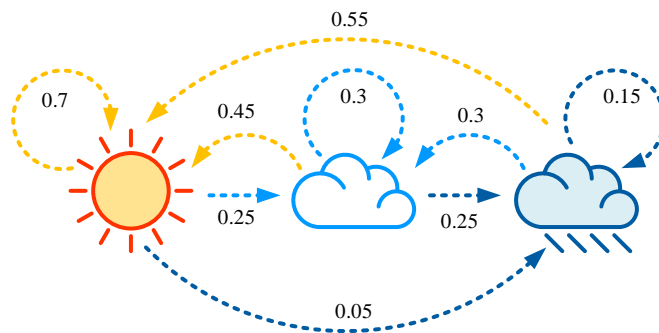


图 21. 三个天气状态之间的转换概率

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。

根据马尔科夫过程性质，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；将这一转化写成向量运算如图 22 所示。
- 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；阴天到其他三种天气的转换如图 23 所示。
- 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。雨天到其他三种天气转换如图 24 所示。

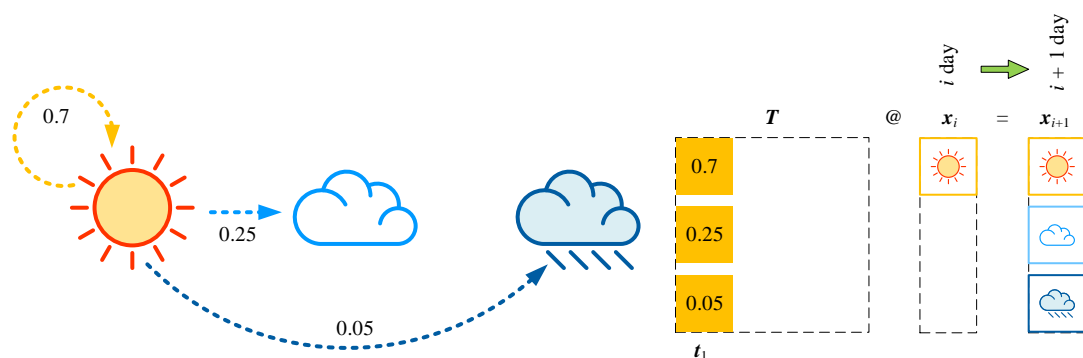


图 22. 上一天为晴天，转换为第二天天气状态

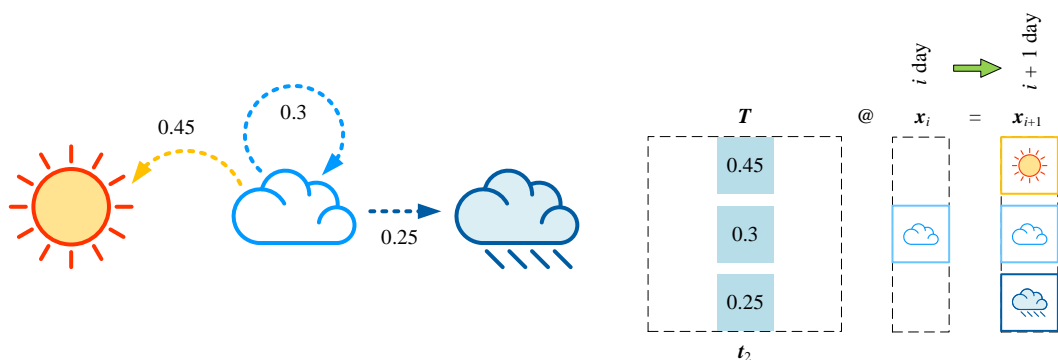


图 23. 上一天为阴天，转换为第二天天气状态

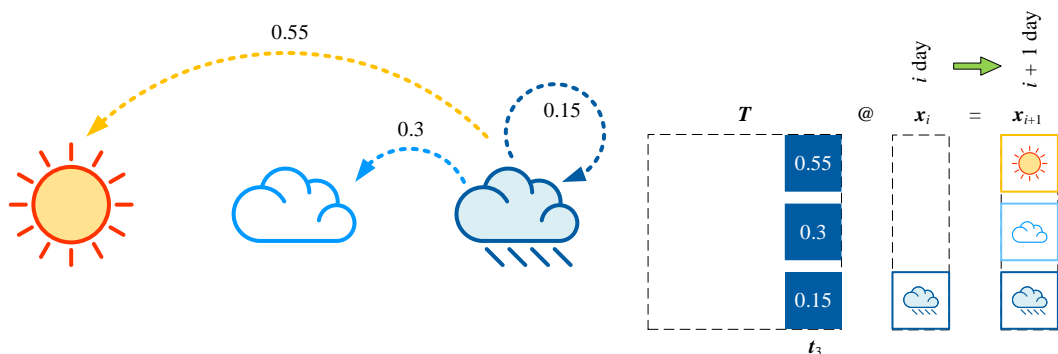


图 24. 上一天为雨天，转换为第二天天气状态

将图 22、图 23 和图 24 中矩阵整合得到转移矩阵。转移矩阵 T 、当前天气状态 x_i 和下一天天气状态 x_{i+1} 三者关系如下所示。

$$x_{i+1} = T x_i \quad (24)$$

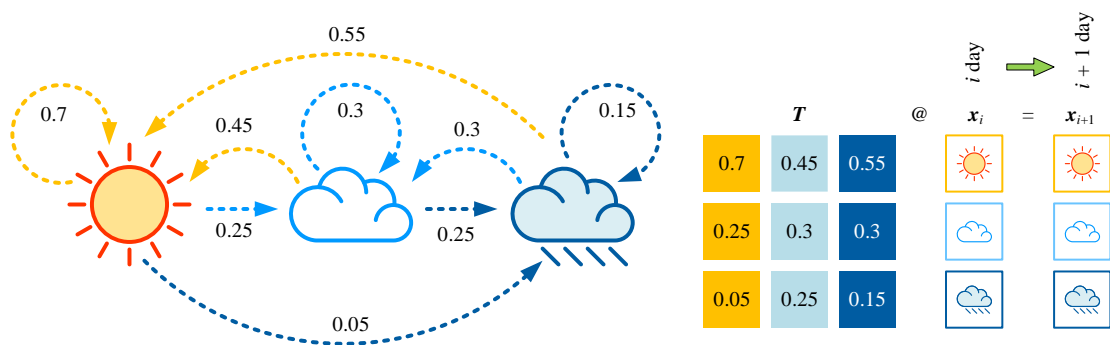


图 25. 天气状态的转移矩阵

从行向量角度看转换矩阵 T ，我们可以得到图 26、图 27 和图 28 三幅图像，请大家自行分析这三个矩阵乘法。

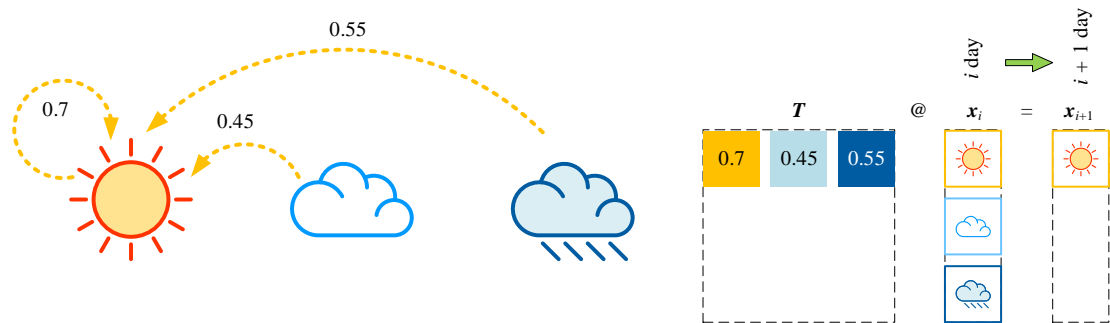


图 26. 当前三种天气状态转换成下一天晴天的运算

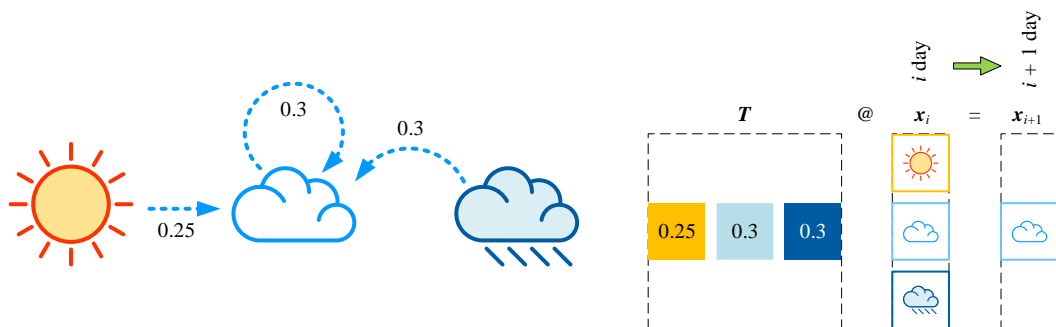


图 27. 当前三种天气状态转换成下一天阴天的运算

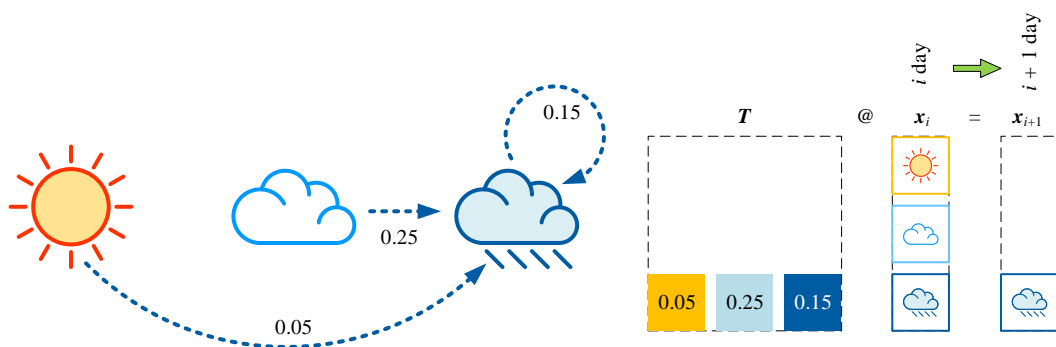


图 28. 当前三种天气状态转换成下一天雨天的运算

图 29、图 30、图 31 所示为不同初始状态开始得到相同的稳态。

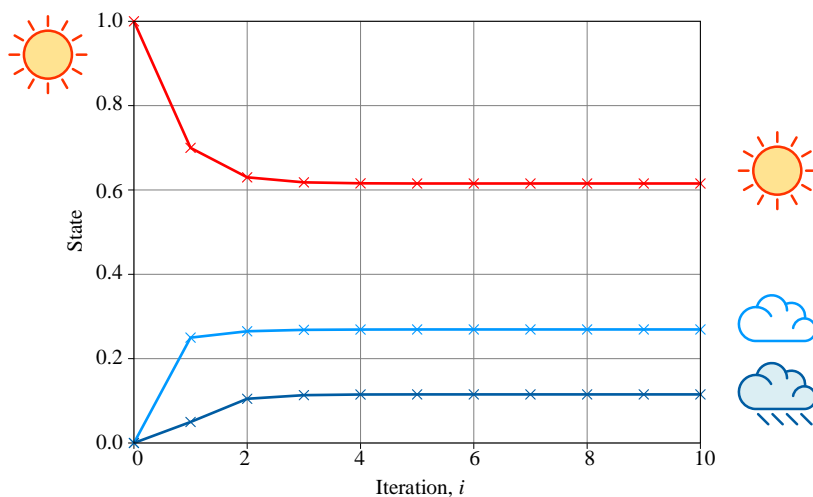


图 29. 从晴天经过转移矩阵变换得到的稳态

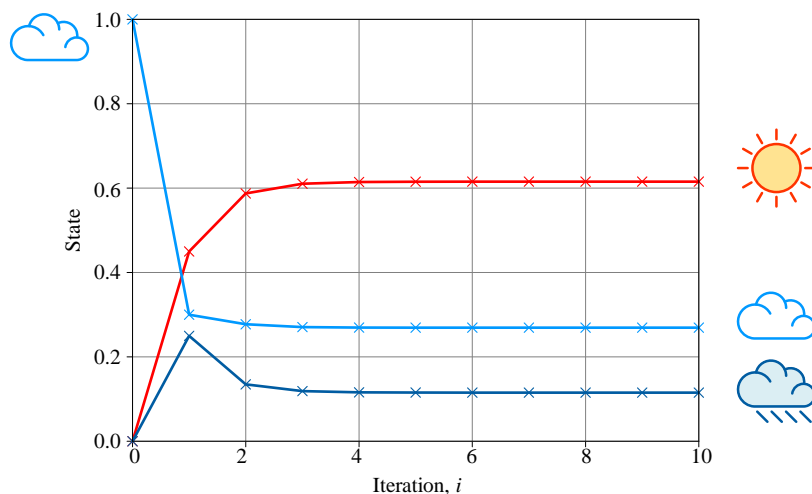


图 30. 从阴天经过转移矩阵变换得到的稳态

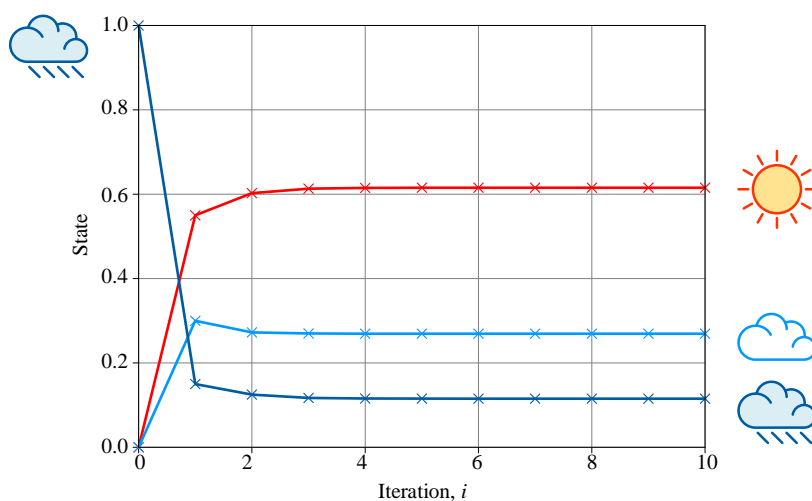
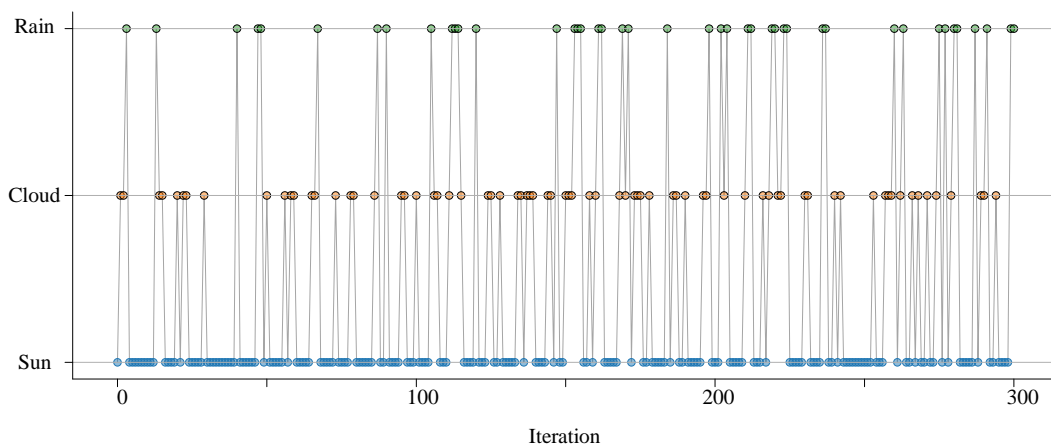


图 31. 从雨天经过转移矩阵变换得到的稳态

图 32 所示为 {晴天, 阴天, 雨天} 这三个状态的马尔科夫链随机行走。图 33 所示为累积概率随时间变化, 容易发现这个马尔科夫过程随机行走最后也趋于稳态。图 34 所示的最终概率结果接近前文计算得到的稳态结果。

Bk6_Ch20_02.ipynb 绘制图 29、图 30、图 31。



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

图 32. 马尔科夫链随机行走

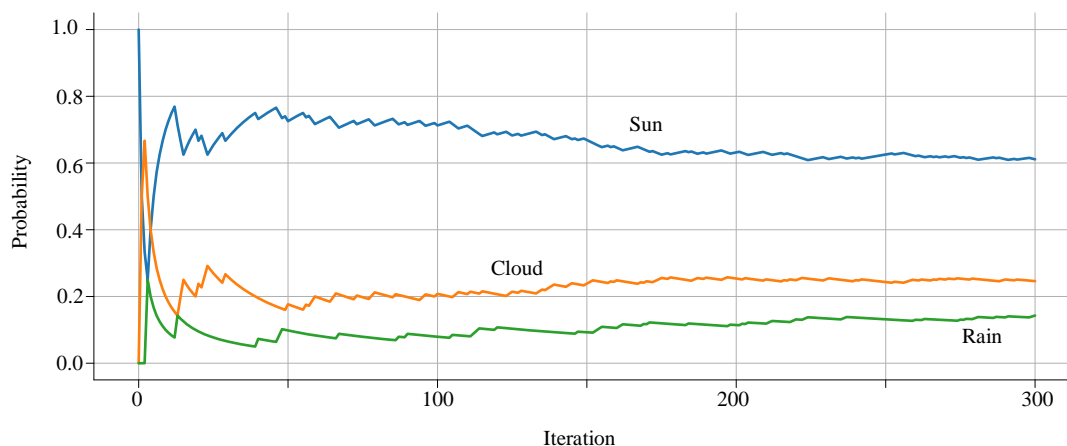


图 33. 累积概率变化

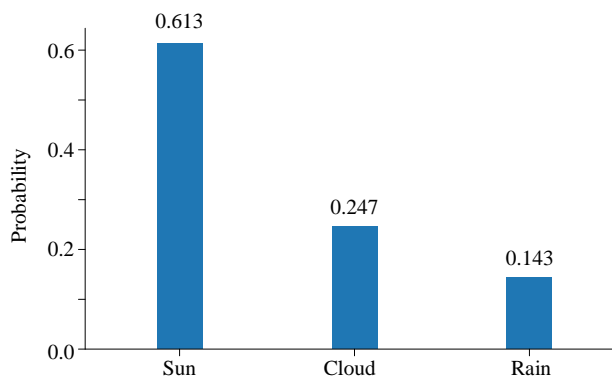


图 34. 马尔科夫链随机行走最终概率结果

本章将代表图的邻接矩阵和马尔科夫链中的转移矩阵联系起来。

在图论中，转移矩阵用于表示图中节点间的转移概率，常见于马尔科夫链。无向图和有向图的邻接矩阵表示节点间是否直接相连，而转移矩阵则进一步表示从一个节点转移到另一个节点的概率。请大家注意，无向图的邻接矩阵为对称矩阵；有向图的邻接矩阵多数为不对称矩阵。

在马尔科夫链中，转移矩阵用于预测系统随时间演进的状态变化。稳态是系统状态经过足够多次转移后趋于稳定的分布。不可约性、非周期性和正常返这三个概念描述了马尔科夫链的长期行为和结构特性。不可约和非周期性通常是确定马尔科夫链是否收敛到一个唯一的平稳分布的关键条件。正常返状态保证了马尔科夫链将不断地返回到这些状态。转移矩阵的特征值分解可用于计算稳态。