

数学模型 Lecture Notes

Zhennan Zhou

2018 年 5 月 29 日

PRELIMINARY DRAFT. NOT FOR WIDE CIRCULATION.

7 马氏链模型

The sciences do not try to explain, they hardly even try to interpret, they mainly make models. By a model is meant a mathematical construct which, with the addition of certain verbal interpretations, describes observed phenomena. The justification of such a mathematical construct is solely and precisely that it is expected to work.

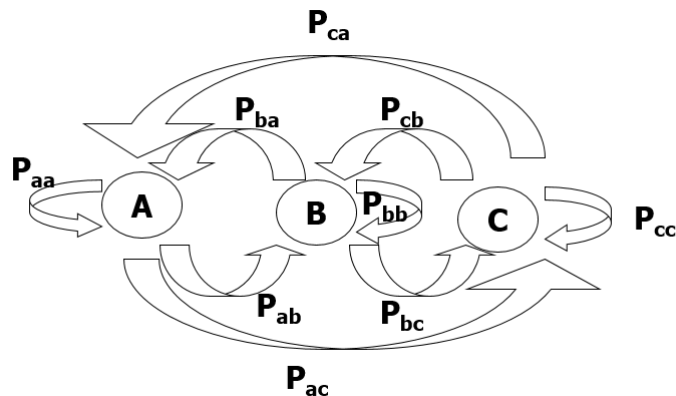
— John von Neumann

7.1 马氏链模型和数学理论

在考虑随机动态系统时，系统在每个时刻所处的状态是随机的，从这个时期到下一个时期的状态按照一定的概率进行转移，并且下个时期的状态这个时期的状态和转移概率，与以前各个时期的状态无关，这种性质称为无后效性，或马尔科夫（Markov）性。这种随机转移过程通常用马氏链模型来描述。

7.1.1 引例

某大学有三个食堂A、B、C。调查显示：在食堂A就餐的人中 p_{aa} 部分仍然回到食堂A，有 p_{ab} 部分选择食堂B， p_{ac} 部分选择食堂C；在食堂B就餐的人中 p_{bb} 部分仍然回到食堂B，有 p_{ba} 部分选择食堂A， p_{bc} 部分选择食堂C；在食堂C就餐的人中 p_{cc} 部分仍然回到食堂C，有 p_{ca} 部分选择食堂A， p_{cb} 部分选择食堂B；如图所示。



- 令 A_n 为第 n 天在食堂A就餐的人数比例;

- 令 B_n 为第 n 天在食堂 B 就餐的人数比例;
- 令 C_n 为第 n 天在食堂 C 就餐的人数比例。

于是我们有

$$\pi_{n+1}^T := \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \\ C_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{aa}A_n + p_{ba}B_n + p_{ca}C_n \\ p_{ab}A_n + p_{bb}B_n + p_{cb}C_n \\ p_{ac}A_n + p_{bc}B_n + p_{cc}C_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{aa} & p_{ba} & p_{ca} \\ p_{ab} & p_{bb} & p_{cb} \\ p_{ac} & p_{bc} & p_{cc} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \\ C_n \end{pmatrix} =: P^T \pi_n^T = (\pi_n P)^T.$$

7.1.2 马氏链选讲

我们回忆到, 对于离散的时间 $t = 0, 1, \dots$ 的每一个 t 对应一个随机变量 $\xi_t(\omega)$, 我们把 $\{\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_n, \dots\}$ 这样一个随机变量的序列叫做离散时间的随机过程。

所有 $\xi_n(\omega)$ 具有公共的取值集合, 我们把此集合叫做状态空间, 记为 S , 其元素称为状态。

离散时间离散状态的随机过程 $\{\xi_n, n \geq 0\}$, 状态空间 S 为有限或者可数集合, 如果满足

$$\Pr(\xi_{n+1} = j | \xi_n = i, \xi_{n-1} = i_{n-1}, \dots, \xi_0 = i_0) = \Pr(\xi_{n+1} = j | \xi_n = i),$$

称其为一个离散时间马氏链, 其中的条件概率 $\Pr(\xi_{n+1} = j | \xi_n = i)$ 称为其在时刻 n 处的转移概率 $p_{ij}(n)$, $P(n) = (p_{ij}(n))$ 称为时刻 n 处的转移概率矩阵。

如果马氏链的转移矩阵与出发时刻无关, 即 $P(n)$ 与 n 无关, 则称此马氏链是时齐的。这时可将转移概率矩阵简记为 $P = (p_{ij})$ 。通常不特别说明, 马氏链就指时齐马氏链。

对于状态空间有限的情况, 马氏链的基本方程为

$$a_i(n+1) = \sum_{j=1}^k a_j(n) p_{ji}, \quad i = 1, \dots, k.$$

这里, 我们要求

$$\sum_{j=1}^k a_j(n) = 1, \quad n = 0, 1, \dots$$

$$p_{ij} \geq 0, \quad i, j = 1, \dots, k. \quad \sum_{j=1}^k p_{ij} = 1, \quad i = 1, \dots, k.$$

如果我们记状态概率向量

$$\mathbf{a}(n) = (a_1(n), \dots, a_k(n)), \quad n = 0, 1, \dots$$

则我们有

$$\mathbf{a}(n+1) = \mathbf{a}(n)P, \quad \mathbf{a}(n) = \mathbf{a}(0)P^n.$$

状态空间 S 上的一个概率分布称为转移概率矩阵 P 的不变概率分布(简称不变分布), 如果

$$\pi P = \pi, \quad \sum_{j=1}^k \pi_j = 1, \quad \pi_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, k.$$

注意, 这时候, π^T 可以看作是 P^T 特征值为 1 的特征向量, 即

$$P^T \pi^T = 1 \pi^T.$$

例子 1. 考虑如下转移矩阵

$$P = \begin{pmatrix} 1-a & a \\ b & 1-b \end{pmatrix}, \quad 0 \leq a, b \leq 1, a+b > 0.$$

特征值为 1 和 $1-(a+b)$, 相应的特征向量为

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix}.$$

于是有相似变换

$$\begin{aligned} P &= \begin{pmatrix} 1-a & a \\ b & 1-b \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & -b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1-a-b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & -b \end{pmatrix}^{-1}. \end{aligned}$$

通过计算, 我们容易得到

$$\begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & -b \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{a+b} \begin{pmatrix} b & a \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

于是,

$$\begin{aligned} P^n &= \begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & -b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & (1-a-b)^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & -b \end{pmatrix}^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & -b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & (1-a-b)^n \end{pmatrix} \frac{1}{a+b} \begin{pmatrix} b & a \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

下面我们分三种情况讨论,

- Case A. $0 < a+b < 2, a \neq 1, b \neq 1$, 则所有元素非 0,

$$\begin{aligned} P^n &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & -b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{a+b} \begin{pmatrix} b & a \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{a+b} \begin{pmatrix} b & a \\ b & a \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

容易验证, 此时, 不变分布为 $\pi = [\frac{b}{a+b}, \frac{a}{a+b}]$.

- Case B. $a = b = 0$, P 为单位矩阵, $P^n = P$.
- Case C. $a = b = 1$, 则

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad P^{2k} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I, \quad P^{2k+1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = P.$$

此时 P^n 极限不存在。但平均极限存在

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n P^k = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

下面, 我们考虑一个有实际背景的例子。

例子 2. Ehrenfest模型。 容器内有 $2a$ 个粒子，一张薄膜将容器分成对称的 A,B 两部分。将粒子穿过薄膜时占用的时间忽略不计。用 X_0 表示初始时 A 中的粒子数， X_n 表示有 n 个粒子穿过薄膜后 A 中的粒子数。假设 $\{X_n\}$ 是马氏链，有状态空间 $I = \{0, 1, \dots, 2a\}$ 。设转移概率

$$p_{ij} = \begin{cases} \frac{2a-i}{2a}, & 0 \leq i \leq 2a-1, j = i+1, \\ \frac{i}{2a}, & 1 \leq i \leq 2a, j = i-1, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

已知该马氏链的不变分布唯一存在，计算不变分布 π 。

补充定义 $\pi_{-1} = \pi_{2a+1} = 0$, 则方程组 $\pi P = \pi$ 可以写成

$$\pi_i = \pi_{i-1}p_{i-1,i} + \pi_{i+1}p_{i+1,i}, \quad 0 \leq i \leq 2a.$$

注意到，这其实是一族的代数方程（参考第四章差分方程的一般形式），我们可以把它写成

$$\pi_{i+1} = \frac{\pi_i - \pi_{i-1}p_{i-1,i}}{p_{i+1,i}}.$$

于是，我们可以顺次计算

$$\begin{aligned} \pi_1 &= \frac{\pi_0}{p_{10}} = 2a\pi_0 = C_{2a}^1\pi_0. \\ \pi_2 &= \frac{\pi_1 - \pi_0 p_{01}}{p_{21}} = \frac{(\pi_1 - \pi_0)2a}{2} = (2a-1)a\pi_0 = C_{2a}^2\pi_0. \\ \pi_3 &= \dots = C_{2a}^3\pi_0. \\ &\dots \\ \pi_{2a} &= C_{2a}^{2a}\pi_0. \end{aligned}$$

利用

$$\pi_0 + \pi_1 + \dots + \pi_{2a} = 2^{2a}\pi_0 = 1,$$

得到 $\pi_0 = 2^{-2a}$ 。历史我们得到不变分布

$$\pi_i = C_{2a}^i \left(\frac{1}{2}\right)^{2a} = C_{2a}^i \left(\frac{1}{2}\right)^i \left(\frac{1}{2}\right)^{2a-i}, \quad i = 0, \dots, 2a.$$

这是一个二项分布，说明在不变分布下，或者时间充分长以后，各个粒子的位置是相互独立的，每个粒子在 A 的概率是 $1/2$ 。

对于马氏链，我们进一步引入几个相关概念

- 可达：状态 i 称为可达状态 j , 如果存在一个指标序列 $i_0 = i, i_1, \dots, i_n = j$, 使得

$$p_{i_k, i_{k+1}} > 0 \quad k = 0, 1, \dots, n-1.$$

用转移概率矩阵来刻画 i 可达 j :

$$\exists n > 0, (p^n)_{ij} > 0.$$

这里， $(p^n)_{ij} = \Pr(\xi_n = j | \xi_0 = i)$ 是 n 步转移概率。

- 吸收：如果 $p_{ii} = 1$, 则称 i 是吸引（吸收）状态。

- 互通：状态*i*可达状态*j*，而且状态*j*可达状态*i*。
- 不可约：如果所有状态之间是互通的。
- 首达概率：令 $f_{ij}(n)$ 为由 *i* 出发在 *n* 步后首次达到 *j* 的概率，简称首达概率。即

$$f_{ij}^{(n)} = \Pr(\xi_n = j, \xi_m \neq j, m = 1, \dots, n-1 | \xi_0 = i).$$

- 令 f_{ij}^* 是从 *i* 出发到达 *j* 的概率，即

$$f_{ij}^* = \sum_{n=1}^{\infty} f_{ij}^{(n)} \leq 1.$$

- 常返性：马氏链的状态*y*称为常返的，如果 $f_{ii}^* = 1$ ，否则称为暂态（非常返态）。对于常返态 *y*，有概率为1地发生如下事件：从*y*出发的状态，经过有限时间内必定回到状态*y*，即存在 $n > 0$ ，使得

$$\Pr(\xi_n = y | \xi_0 = y) = 1.$$

- 转移概率和首达概率满足如下的分解关系：

$$(p^n)_{ij} = \sum_{k=1}^n f_{ij}^{(k)} (p^{n-k})_{jj}.$$

例子 3. 等级结构。 设一个社会从低到高分成了 *k* 个等级。时间以年为单位离散化，即每年只进行一次调动。等级记作 $i = 1, \dots, k$ 。时间记作 $t = 0, 1, \dots$ 我们引入如下的记号：

- $\mathbf{n}(t) = (n_1(t), \dots, n_k(t))$ ， $n_i(t)$ 为第 *t* 年属于等级 *i* 的人数； $N(t) = \sum_{i=1}^k n_i(t)$ 为第 *t* 年的总人数。
- $\mathbf{a}(t) = (a_1(t), \dots, a_k(t))$ 称等级结构， $a_i(t) = \frac{n_i(t)}{N(t)}$ 为第 *t* 年属于等级 *i* 的人数比例， $\sum_{i=1}^k a_i(t) = 1$ 。
- $Q = \{p_{ij}\}_{k \times k}$ ， p_{ij} 为每年从等级 *i* 转移至等级 *j*（在等级 *i* 中占）的比例。
- $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_k)$ 为每年从等级 *i* 退出（在等级 *i* 中占）的比例。第 *t* 年退出的总人数为

$$W(t) = \sum_{i=1}^k w_i n_i(t) = \mathbf{n}(t) \mathbf{w}^T.$$

而且，我们可以看出

$$\sum_{i=1}^k p_{ji} + w_j = 1, \quad j = 1, \dots, k.$$

- $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_k)$ 为每年调入等级 *i* 的在总调入人数的比例。第 *t* 年调入的总人数为 $R(t)$ ，则第 *t* 年调入等级 *i* 的人数为 $r_i R(t)$ 。显然， $\sum_{i=1}^k r_i = 1$ 。

为了导出 $\mathbf{n}(t)$ 的变化规律，我们先注意到

$$N(t+1) = N(t) + R(t) - W(t).$$

而且

$$n_j(t+1) = \sum_{i=1}^k p_{ij} n_i(t) + r_j R(t), \quad j = 1, \dots, k.$$

用矩阵来表示，则有

$$\mathbf{n}(t+1) = \mathbf{n}(t)Q + R(t)\mathbf{r}.$$

但是需要注意的是， Q 并非概率转移矩阵（想想为什么）。我们用 $M(t)$ 表示 t 到 $t+1$ 年的净增长量，则

$$R(t) = W(t) + M(t) = \mathbf{n}(t)\mathbf{w}^T + M(t)$$

我们代入可得，

$$\mathbf{n}(t+1) = \mathbf{n}(t)(Q + \mathbf{w}^T \mathbf{r}) + M(t)\mathbf{r} =: \mathbf{n}(t)P + M(t)\mathbf{r}.$$

注意， P 的行和是 1，所以 P 是一个概率转移矩阵。

下面我们考虑一个特殊的形式， $M(t) = \alpha N(t)$ ，即每年的总人数按照百分比 α 增长，可以推出等级结构满足的方程为

$$\mathbf{a}(t+1) = (1 + \alpha)^{-1}(\mathbf{a}(t)P + \alpha \mathbf{r}).$$

特别的，如果我们进一步假设每年总人数不变，那么 $\alpha = 0$ ，于是我们有

$$\mathbf{a}(t+1) = \mathbf{a}(t)P = \mathbf{a}(t)(Q + \mathbf{w}^T \mathbf{r}).$$

根据这个方程，对于某个等级结构 $\mathbf{a}$ ，如果存在调入比例 $\mathbf{r}$ ，使得

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}P = \mathbf{a}(Q + \mathbf{w}^T \mathbf{r}). \quad (7.1)$$

则称 $\mathbf{a}$ 为稳定结构。注意，这里的 $\mathbf{r}$ 需要满足

$$\sum_{i=1}^k r_i = 1, \quad r_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, k.$$

由(7.1)，我们得到

$$\mathbf{r} = \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}Q}{\mathbf{a}\mathbf{w}^T}.$$

得以验证 $\sum_{i=1}^k r_i = 1$ 是满足的，但是为了 $r_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, k$ ，我们可以稳定结构 $\mathbf{a}$ 的范围由

$$\mathbf{a} \geq \mathbf{a}Q$$

决定，这称为等级结构的稳定域。

最后我们讨论用调入比例 r 对等级结构进行动态调节。设理想的等级结构是 $\mathbf{a}^*$ ，并假设 $\mathbf{a}^*$ 在稳定域里面。已知 $\mathbf{a}(0)$ ，求调入比例 $\mathbf{r}$ 使得 $\mathbf{a}(1)$ 尽可能的接近 $\mathbf{a}^*$ 。再求一个新的调入比例 $\mathbf{r}$ 使得 $\mathbf{a}(2)$ 尽可能的接近 $\mathbf{a}^*$ ，以此类推。

对于等级结构，我们首先引入任意两个等级结构 $\mathbf{a}^{(1)} = (a_1^{(1)}, \dots, a_k^{(1)})$ 和 $\mathbf{a}^{(2)} = (a_1^{(2)}, \dots, a_k^{(2)})$ 之间的距离

$$D(\mathbf{a}^{(1)}, \mathbf{a}^{(2)}) = \sum_{i=1}^k \lambda_i (a_i^{(1)} - a_i^{(2)})^2,$$

其中 $\lambda_i \geq 0$ 为加权因子。

我们可以把问题总结为 (E1)

$$\begin{aligned} \min_{r_i} \quad & D(\mathbf{a}(1), \mathbf{a}^*) \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{a}(1) = \mathbf{a}(0)(Q + \mathbf{w}^T \mathbf{r}), \quad \sum_{i=1}^k r_i = 1, \quad r_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, k. \end{aligned}$$

注意到，

$$\mathbf{a}^* - \mathbf{a}(1) = \mathbf{a}(0)\mathbf{w}^T \left[\frac{\mathbf{a}^* - \mathbf{a}(0)Q}{\mathbf{a}(0)\mathbf{w}^T} - \mathbf{r} \right].$$

如果记

$$\mathbf{y} = \frac{\mathbf{a}^* - \mathbf{a}(0)Q}{\mathbf{a}(0)\mathbf{w}^T}, \quad \mathbf{y} = (y_1, \dots, y_k),$$

则 $\mathbf{a}^* - \mathbf{a}(1)$ 与 $\mathbf{y} - \mathbf{r}$ 成正比，而且容易验证 $\sum_{i=1}^k y_i = 1$ 。

于是，我们把问题转化为 (E2)

$$\begin{aligned} \min_{r_i} \quad & \sum_{i=1}^k \lambda_i (y_i - r_i)^2 \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^k r_i = 1, \quad r_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, k. \end{aligned}$$

不妨令 $\mathbf{r}^*$ 表示最优值。

我们注意到，如果 $y_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, k$ ，则 (E2) 的解显然为

$$r_i = y_i, \quad i = 1, \dots, k.$$

否则，我们将 $\{1, \dots, k\}$ 按按照 y_i 的符号分成两部分 I_1 和 I_2 ，即

$$y_j > 0, \quad \forall j \in I_1; \quad y_l \leq 0, \quad \forall l \in I_2.$$

于是，我们有

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i (y_i - r_i)^2 = \sum_{j \in I_1} \lambda_j (y_j - r_j)^2 + \sum_{l \in I_2} \lambda_l (|y_l| + r_l)^2.$$

注意到， $\sum_{j \in I_1} y_j > 1$ ，易知若使和式最小，应有

$$r_j \leq y_j, \quad \forall j \in I_1; \quad r_l = r_l^* = 0, \quad \forall l \in I_2.$$

最后，我们得到问题 (E3)

$$\begin{aligned} \min_{r_j, j \in I_1} \quad & \sum_{j \in I_1} \lambda_j (y_j - r_j)^2 \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{j \in I_1} r_j = 1, \quad y_j \geq r_j \geq 0, \quad j \in I_1. \end{aligned}$$

利用拉格朗日因子法，我们可以求解这个条件极值问题。我们引入因子 α ，(E3) 的目标函数为

$$G = \sum_{j \in I_1} \lambda_j (y_j - r_j)^2 + 2\alpha \sum_{j \in I_1} r_j.$$

利用 $\partial G / \partial r_j = 0$ ，可知

$$r_j = y_j - \frac{\alpha}{\lambda_j}.$$

再利用 $\sum_{j \in I_1} r_j = 1$ 可以得到，如果令

$$\alpha = \frac{\sum_{j \in I_1} y_j - 1}{\sum_{j \in I_1} \lambda_j^{-1}},$$

于是我们得到

$$r_j = y_j - \frac{\alpha}{\lambda_j}, \quad j \in I_1.$$

注意，我们在求解中并没有要求 $y_j \geq r_j \geq 0$ 。显然， $y_j \geq r_j$ 对所有的 j 是满足的，但是可能存在 $j' \in I_1$ ，使得 $r_{j'} < 0$ 。这时候，我们令 $r_{j'}^* = 0$ ，然后利用 $\sum_{j \in I_1, j \neq j'} r_j = 1$ 重新定义 α ，然后再次求解剩下的 r_j 。重复以上操作，直到得到非空的 $I_1^* \subset I_1$ ，使得 $\forall j \in I_1^*, r_j = y_j - \frac{\alpha}{\lambda_j} \in [0, y_j]$ 。此时，

$$\alpha = \alpha^* = \frac{\sum_{j \in I_1^*} y_j - 1}{\sum_{j \in I_1^*} \lambda_j^{-1}},$$

最终，(E3) 的解为

$$r_j^* = \begin{cases} y_j - \frac{\alpha^*}{\lambda_j}, & j \in I_1^*; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

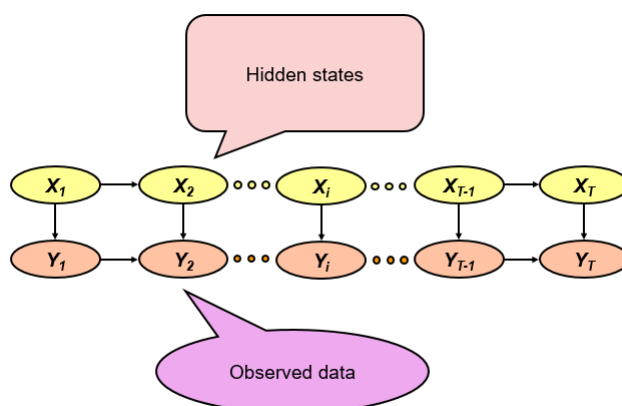
7.2 隐马氏链的理论初步

7.2.1 引例和数学模型

设某人在三个装有红白两种颜色球的盒子中，任取一个盒子，然后在此盒子中每次抽取一个球，连续地抽取多次。假定各个盒子的内容与抽取方式分别为：

	红球数	白球数	抽取方式
盒 1	90	10	随机取一球，记下颜色后不放回，而放进一个与它颜色不同的球。
盒 2	50	50	随机取一球，记下颜色后放回。
盒 3	40	60	随机取一球，记下颜色后不放回，并放进一个红球。

现在如果某人用上述方法得到了一个记录: (红,红,红,红,白)，但是不告诉我们球出自哪个盒子，我们应如何推测他是从哪个盒子中抽取的观测样本呢？



令在第 k 个盒子中第 n 次抽取完成后在各盒中的红球数 $S_n^{(k)}$ ，那么每个盒对应一个以 S 为状态的马氏链，初始状态分别为： $S_0^{(1)} = 90, S_0^{(2)} = 50, S_0^{(3)} = 40$ 。

O_n = 抽到的记录列中第 n 个记录中所记录的球的颜色是否为红色。

注意，在这个例子中，在已知观测出自哪个盒子时，状态序列由观测序列唯一确定的。

n	0	1	2	3	4	5
O_n	--	1	1	1	1	0
$S_n^{(1)}$	90	89	88	87	86	87
$S_n^{(2)}$	50	50	50	50	50	50
$S_n^{(3)}$	40	40	40	40	40	41

设概率转移矩阵分别为 $P_{ij}^{(1)}, P_{ij}^{(2)}, P_{ij}^{(3)}$ 。

$$P_{ij}^{(1)} = \begin{cases} \frac{i}{100}, & (j = i - 1) \\ 1 - \frac{i}{100}, & (j = i + 1) \\ 0, & (\text{others}) \end{cases} \quad P_{ij}^{(2)} = \begin{cases} 1, & (j = i) \\ 0, & (j \neq i) \end{cases} \quad P_{ij}^{(3)} = \begin{cases} \frac{i}{100}, & (j = i) \\ 1 - \frac{i}{100}, & (j = i + 1) \\ 0, & (\text{others}) \end{cases}$$

观测随机变量序列与状态随机变量序列 $S_0, O_1, S_1, \dots, O_m, S_m, \dots$ 之间的条件概率非零的如下。

$$\Pr(O_n = 1 | S_{n-1}^{(1)} = i, S_n^{(1)} = i - 1) = 1, \quad \Pr(O_n = 0 | S_{n-1}^{(1)} = i, S_n^{(1)} = i + 1) = 1.$$

$$\begin{aligned}\Pr(O_n = 1 | S_{n-1}^{(2)} = i, S_n^{(2)} = i) &= \frac{1}{2}, \quad \Pr(O_n = 0 | S_{n-1}^{(2)} = i, S_n^{(2)} = i) = \frac{1}{2}. \\ \Pr(O_n = 1 | S_{n-1}^{(3)} = i, S_n^{(3)} = i) &= 1, \quad \Pr(O_n = 0 | S_{n-1}^{(3)} = i, S_n^{(3)} = i + 1) = 1.\end{aligned}$$

注意到,

$$\begin{aligned}\Pr(S_0, O_1, S_1, \dots, O_m, S_m) \\ = \Pr(S_0) \Pr(S_1 | S_0) \Pr(O_1 | S_0, S_1) \cdots \Pr(S_m | S_{m-1}) \Pr(O_m | S_{m-1}, S_m).\end{aligned}$$

这说明, 状态与观测的联合概率可以用状态的转移概率、状态给定时观测的条件概率以及状态的初始分布来表示。

不妨讲三个盒子分别用参数 λ_1 , λ_2 和 λ_3 来表示。如果我们令事件 A 为 $(O_1, \dots, O_5) = (1, 1, 1, 1, 0)$ 那么,

- 在模型 λ_1 下,

$$\Pr(A | \lambda_1) = 0.90 * 0.89 * 0.88 * 0.87 * 0.13 = 0.07972.$$

- 在模型 λ_2 下,

$$\Pr(A | \lambda_2) = 0.03125.$$

- 在模型 λ_3 下,

$$\Pr(A | \lambda_3) = 0.01536.$$

于是, 我们利用Bayes公式可得,

$$\Pr(\lambda_1 | A) = 0.6310, \quad \Pr(\lambda_2 | A) = 0.2474, \quad \Pr(\lambda_3 | A) = 0.1216.$$

所以, 我们得出结论, 球更可能出自于第一个盒子。

最后我们引入隐马氏链的数学模型:

- 隐过程为 $X = \{X_1, \dots, X_T\}$, $X_i \in \{1, \dots, N\}$.
- 观察过程为 $Y = \{Y_1, \dots, Y_T\}$, $Y_i \in \{1, \dots, M\}$.
- 模型参数为 $\lambda = \{\pi, A, B\}$, 其中
 - 初始分布 $\pi = (\pi_i)$, $\pi_i = \Pr(X_1 = i)$.
 - 转移矩阵 $A = (a_{ij})$, $a_{ij} = \Pr(X_{n+1} = j | X_n = i)$.
 - 给定某时间的隐状态条件下, 观测的分布矩阵 $B = (b_{i\ell})$, $b_{i\ell} = b_i(\ell) = \Pr(Y_n = \ell | X_n = i)$.

7.2.2 识别问题

在已知若干个模型及其参数的情况下, 识别问题就是一个对于给定样本进行 Bayesian 判决的问题。

判决步骤:

- 根据参数求出在每一个模型中, 出现给定样本的概率 $\Pr(Y | \lambda)$, 归一化就得到给定样本来自每个模型的概率 $\Pr(\lambda | Y)$ 。
- 根据“后验概率” $\Pr(\lambda | Y)$, 就可以得到最好的模型猜测。

考虑观测序列的概率计算，可以采用枚举法

$$\begin{aligned}\Pr(Y = y|\lambda) &= \sum_{x=(x_1, \dots, x_T)} \Pr(Y = y|X = x, \lambda) \Pr(X = x|\lambda) \\ &= \sum_{x=(x_1, \dots, x_T)} \pi(x_1) b_{x_1}(y_1) a_{x_1 x_2} b_{x_2}(y_2) \cdots a_{x_{T-1} x_T} b_{x_T}(y_T).\end{aligned}$$

枚举法的计算复杂度为 $O(TN^T)$ ，随着 T 增加而指数型增长。

下面介绍两个多项式复杂度的算法。

前传算法 (Forward Algorithm)。 我们定义

$$\alpha_t(i) = \Pr(y_1, y_2, \dots, y_t, x_t = i|\lambda).$$

注意到如下的递推关系:

$$\begin{aligned}\alpha_{t+1}(i) &= \Pr(y_1, y_2, \dots, y_{t+1}, x_{t+1} = i|\lambda) \\ &= \sum_j \Pr(y_1, y_2, \dots, y_{t+1}, x_t = j, x_{t+1} = i|\lambda) \\ &= \sum_j \Pr(y_1, y_2, \dots, y_t, x_t = j|\lambda) \Pr(y_{t+1}, x_{t+1} = i|x_t = j, \lambda) \\ &= \sum_j \alpha_t(j) a_{ji} b_i(y_{t+1}).\end{aligned}$$

于是，前传算法如下:

- 初始化

$$\alpha_1(i) = \pi_i b_i(y_1), \quad i = 1, 2, \dots, N.$$

- 迭代

$$\alpha_{t+1}(i) = \sum_{j=1}^N \alpha_t(j) a_{ji} b_i(y_{t+1}) \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad t = 1, 2, \dots, T-1.$$

- 结束

$$\Pr(Y|\lambda) = \sum_{i=1}^N \alpha_T(i).$$

后传算法 (Backward Algorithm)。 我们定义

$$\beta_t(i) = \Pr(y_{t+1}, y_{t+2}, \dots, y_T | x_t = i, \lambda).$$

注意到如下的递推关系:

$$\begin{aligned}\beta_t(i) &= \sum_j \Pr(y_{t+1}, y_{t+2}, \dots, y_T, x_{t+1} = j | x_t = i, \lambda) \\ &= \sum_j \Pr(y_{t+2}, \dots, y_T | x_{t+1} = j, \lambda) \Pr(y_{t+1}, x_{t+1} = j | x_t = i, \lambda) \\ &= \sum_j \beta_{t+1}(j) a_{ij} b_j(y_{t+1}).\end{aligned}$$

于是，后传算法如下:

- 初始化 (想想为什么)

$$\beta_T(i) = 1, \quad i = 1, 2, \dots, N;$$

- 迭代

$$\beta_t(i) = \sum_{j=1}^N \beta_{t+1}(j) a_{ij} b_j(y_{t+1}) \quad 1 \leq i \leq N, \quad t = T-1, \dots, 1;$$

- 结束

$$\Pr(Y|\lambda) = \sum_{i=1}^N \beta_1(i) \pi_i b_i(y_1).$$

7.2.3 学习问题

学习问题: 就是由观测估计模型参数。需要注意的事, 不同于识别问题 (里面有若干个模型和若干套参数, 但是参数已知), 学习问题中往往是一个模型, 可是模型参数未知 (或者部分未知)。

学习的两种情况

- 观测链相应的状态链已知;
- 观测链相应的状态链未知。

极大似然估计 (Maximum likelihood estimation, or MLE)

$$\hat{\lambda} = \underset{\lambda}{\operatorname{Argmax}} \Pr(y_1, \dots, y_T | \lambda).$$

注意, 状态链已知时 (不妨设为 $X_1, \dots, X_T$), 我们仅需考虑

$$\Pr(y_1, \dots, y_T, X_1, \dots, X_T | \lambda).$$

状态链未知时,

$$\Pr(y_1, \dots, y_T | \lambda) = \sum_{(X_1, \dots, X_T)} \Pr(y_1, \dots, y_T, X_1, \dots, X_T | \lambda).$$

下面我们考虑状态链已知时的MLE。我们定义

$$1_a(b) = \begin{cases} 1, & a = b. \\ 0, & a \neq b. \end{cases}$$

现在, 我们将 likelihood function 表达成模型参数 ($\lambda = \{\pi, A, B\}$) 的函数

$$\begin{aligned} \Pr(y_1, \dots, y_T; X_1, \dots, X_T | \lambda) &= \pi_{X_1} \prod_{t=1}^{T-1} a_{X_t X_{t+1}} \prod_{t=1}^T b_{X_t}(y_t) \\ &= \prod_i \pi_i^{1_i(X_1)} \prod_{i,j} a_{ij}^{\sum_{t=1}^{T-1} 1_i(X_t) 1_j(X_{t+1})} \prod_{i,l} b_i(l)^{\sum_{t=1}^T 1_i(X_t) 1_l(y_t)} \\ &= \prod_i \pi_i^{C_i} \prod_{i,j} a_{ij}^{A_{ij}} \prod_{i,l} b_i(l)^{B_{il}}. \end{aligned}$$

这里, C_i , A_{ij} 和 B_{il} 被 $y_1, \dots, y_T; X_1, \dots, X_T$ 唯一决定, 而 π_i , a_{ij} 和 $b_i(l)$ 是我们学习的对象。这里, A_{ij} 为从状态 i 到下一个时刻转移为状态 j 的频数, B_{il} 为从状态 i 在同一时刻的观测到状态 l 的频数为 B_{il} 。

我们观察发现

$$\log \Pi_k(x_k)^{z_k} = \sum_k z_k \log x_k.$$

所以，我们可以考虑如下的简单优化问题，设 $\{z_k \geq 0\}$ 已知，

$$\begin{aligned} \text{Max: } & \sum_k z_k \log x_k \\ \text{subject to: } & \sum_k x_k = 1 \\ \text{Estimation: } & x_i = \frac{z_i}{\sum_k z_k}, \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

于是，我们可以对 a_{ij} 估值为

$$\hat{a}_{ij} = \frac{A_{ij}}{\sum_{k=1}^N A_{ik}}.$$

我们可以对 b_{il} 估值为

$$\hat{b}_{il} = \frac{B_{il}}{\sum_{j=1}^M B_{ij}}.$$

可以发现，这其实是一种用频率代替概率的估计。根据大数定律，我们知道这在样本充分大的时候是一个好的估值。

当状态链未知时，由于似然函数的计算中包含了对所有可能的状态链的求和，计算过大，在实际中是不可能被采用的。为此，人们采取折衷的方案，构造一个递推算法，使之能相当合理地给出模型参数的粗略估计。

其核心思想是一种EM（Expectation-maximization algorithm）迭代算法思想。感兴趣的同学可以查阅相关的资料。