機率與統計：從入門到精通

第 11 章　隨機過程、馬可夫鏈與蒙地卡羅

Stochastic Processes, Markov Chains, and Monte Carlo

難度：專家

到目前為止，本書處理的隨機性大多是**靜態**的：抽一次樣本、算一個分布、估一個參數。真實世界卻是在時間中展開的——今天的天氣影響明天的天氣、句子裡的這個詞牽動下一個詞、棋盤上的這一步改變整盤局勢。**隨機過程**把時間加進機率：它是一列彼此相依、隨時間演化的隨機變數。其中最重要的成員——**馬可夫鏈**——除了「現在」什麼都不記得，卻豐富到足以建模語言、網頁瀏覽與物理系統。馬可夫鏈同時驅動了**馬可夫鏈蒙地卡羅**（MCMC）——讓貝氏推論從紙上理論變成可行計算的演算法家族——而且悄悄地是擴散模型等現代生成式 AI 的底層機制。本章把前面各章的分布、期望、大數法則與貝氏定理，組裝成「會動」的模型與演算法。

學習目標

讀完本章後，你將能夠：

- 定義**隨機過程**，並判斷一個過程是否具**馬可夫性質**。
- 由文字敘述建立**轉移矩陣**，用 $\boldsymbol{\pi}_{t+1} = \boldsymbol{\pi}_t \boldsymbol{P}$ 演化分布，以矩陣冪 $\boldsymbol{P}^n$ 算 n 步轉移。
- 求解**穩態分布** $\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\pi}$，敘述**不可約**、**非週期**與收斂定理，解釋 PageRank 為何是穩態分布。
- 用**蒙地卡羅**方法估計期望值，說明 $1/\sqrt{N}$ 誤差律與「收斂速度與維度無關」的意義。
- 解釋 **Metropolis–Hastings** 與 **Gibbs 抽樣**，以**細緻平衡**論證其正確性，理解 burn-in（暖身期）與樣本相關性，並以 Python 實作驗證。

11.1　隨機過程：把時間加進機率

之前各章的主角是「一個」隨機變數，或一組彼此獨立的樣本。可是許多最有趣的隨機現象是**隨時間持續演化**的，而且「現在」與「過去」糾纏在一起：今天下雨，明天放晴的機會有多大？這類問題的共同數學骨架，就是隨機過程。

定義 11.1　隨機過程

隨機過程（stochastic process）是一族以時間為索引、定義在同一機率空間上的隨機變數 $\{X_t\}_{t\in T}$。索引集合 T 代表時間：$T=\{0,1,2,\dots\}$ 稱為**離散時間**，$T=[0,\infty)$ 稱為**連續時間**。X_t 的所有可能取值構成**狀態空間**（state space）S，同樣分為離散與連續兩類。本章聚焦在**離散時間、離散狀態空間**的過程——已足以支撐從 PageRank 到擴散模型的大量應用。

日常與工程中的隨機過程俯拾皆是：**隨機漫步**（random walk，每步上下移動、位置隨時間累積）、每日**股價**、句子中的**字詞序列**（「時間」是詞的位置、狀態空間是詞彙表——語言模型的原點）、棋局的**遊戲狀態**、櫃檯前的**排隊人數**。

最簡單的例子是**簡單對稱隨機漫步**：$\overset{\text{i.i.d.}}{\sim}$ 步伐 $\mathbb{P}(\xi_k=\pm 1)=\frac{1}{2}$，位置 $X_t=\xi_1+\cdots+\xi_t$（$\mathbb{E}[X_t]=0$、$\mathrm{Var}(X_t)=t$：平均哪裡都不去，典型距離卻以 $\sqrt{t}$ 成長）。它展示了本章的新現象——**相依性**：$X_{t+1}=X_t+\xi_{t+1}$ 與 X_t 高度相關，聯合分布不再拆成邊際的乘積；一次「實驗」的結果也不再是一個數字，而是一整條**樣本路徑**（sample path）。相依結構毫無限制則分析寸步難行——我們需要一個「夠簡單又夠有用」的相依性假設。注意：**給定** X_t 之後，X_{t+1} 的分布便與更早的歷史無關——這個觀察正是下一節的主角。

11.2　馬可夫鏈：只記得現在的隨機過程

一般的隨機過程中，X_{t+1} 可以依賴整段歷史 $X_0,X_1,\dots,X_t$，需要指定的條件機率數量隨時間爆炸。馬可夫鏈做了一個大膽的簡化：**未來只透過現在依賴過去**。

定義 11.2　馬可夫性質、馬可夫鏈與轉移矩陣

隨機過程 $\{X_t\}$ 具**馬可夫性質**（Markov property），若對所有 t 與所有狀態，

$$\mathbb{P}(X_{t+1}=j\mid X_t=i,\ X_{t-1}=i_{t-1},\ \dots,\ X_0=i_0)=\mathbb{P}(X_{t+1}=j\mid X_t=i)\,:$$

一旦知道現在的狀態，完整歷史對預測未來不再提供額外資訊——**無記憶**（memoryless）。若此條件機率不隨 t 改變（時間齊次），過程稱為**馬可夫鏈**（Markov chain）。有限狀態空間 $S=\{1,\dots,m\}$ 上的鏈由**轉移矩陣**（transition matrix）$\boldsymbol{P}$ 完全指定：

$$P_{ij}=\mathbb{P}(X_{t+1}=j\mid X_t=i),\qquad P_{ij}\ge 0,\qquad \sum_{j=1}^{m}P_{ij}=1\ \text{（每一列的和為1）},$$

即第 i 列是「從狀態 i 出發，下一步去哪」的完整分布；這樣的非負矩陣稱為**隨機矩陣**（stochastic matrix）。

隨機漫步就是馬可夫鏈：給定 $X_t=i$，下一步的分布（$i\pm 1$ 各半）與更早的歷史無關——只是狀態空間是無限的 $\mathbb{Z}$。有限狀態的鏈更方便：整個動力學塞得進一個矩陣。把時刻 t 的狀態分布寫成**列向量** $\boldsymbol{\pi}_t=[\mathbb{P}(X_t=1),\dots,\mathbb{P}(X_t=m)]$，由全機率定理（第 2 章），

$$(\boldsymbol{\pi}_{t+1})_j=\sum_i \mathbb{P}(X_t=i)\,P_{ij}\quad\Longleftrightarrow\quad \boxed{\boldsymbol{\pi}_{t+1}=\boldsymbol{\pi}_t\boldsymbol{P}}\qquad\text{因此}\qquad \boldsymbol{\pi}_t=\boldsymbol{\pi}_0\boldsymbol{P}^t.$$

直觀理解

「無記憶」**不是**說過去無關緊要——過去當然影響現在。它說的是：**現在的狀態已經總結了所有與未來相關的歷史**。你下一步去哪，只取決於你現在站在哪裡，不取決於你是怎麼走到這裡的。這是一個**建模假設**（通常只是近似），而它換來的報酬極為豐厚：整個系統的動力學被壓縮進一個矩陣 $\boldsymbol{P}$，「讓時間前進一步」變成「把分布向量乘上 $\boldsymbol{P}$ 一次」。機率問題就此變成線性代數問題。

例 11.1　天氣鏈：從敘述到矩陣

某城市的天氣簡化為兩種狀態：晴（狀態 1）與雨（狀態 2）。長期觀測顯示：晴天之後 70% 仍是晴天、30% 轉雨；雨天之後 50% 轉晴、50% 仍下雨。寫出轉移矩陣，並回答：(a) 今天確定是晴天，明天的天氣分布？(b) 今天晴雨機會各半，明天呢？

解　依「列 = 現在狀態、行 = 下一狀態」的約定，

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 0.7 & 0.3 \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix},$$

兩列的和分別為 $0.7+0.3=1$ 與 $0.5+0.5=1$，確為合法的隨機矩陣。

(a) 今天確定晴天：$\boldsymbol{\pi}_0 = [1, 0]$，故 $\boldsymbol{\pi}_1 = \boldsymbol{\pi}_0 \boldsymbol{P} = [0.7,\ 0.3]$——直接讀出 $\boldsymbol{P}$ 的第 1 列。

(b) $\boldsymbol{\pi}_0 = [0.5, 0.5]$ 時，

$$\boldsymbol{\pi}_1 = [0.5\times 0.7 + 0.5\times 0.5,\quad 0.5\times 0.3 + 0.5\times 0.5] = [0.60,\ 0.40].$$

「乘上 $\boldsymbol{P}$」就是全機率定理的矩陣寫法：對每個目的地，加總「出發地機率 × 轉移機率」。

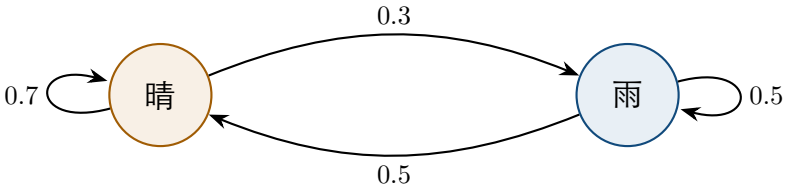


圖 11.1: 天氣鏈的狀態圖：節點是狀態，箭頭上的數字是轉移機率；每個節點**流出**的機率（含自環）總和為 1，對應轉移矩陣「每列和為 1」。

走一步是乘一次 $\boldsymbol{P}$，走 n 步呢？答案優雅得令人愉快：乘 n 次，也就是矩陣冪。

命題 11.3　n 步轉移與 Chapman–Kolmogorov 方程

記 n 步轉移機率 $P_{ij}^{(n)} = \mathbb{P}(X_{t+n} = j \mid X_t = i)$。則

$$P_{ij}^{(n)} = (\boldsymbol{P}^n)_{ij}, \qquad \text{且對任意} m, n \ge 1: \quad (\boldsymbol{P}^{m+n})_{ij} = \sum_{k} (\boldsymbol{P}^m)_{ik} (\boldsymbol{P}^n)_{kj}.$$

後者稱為 **Chapman–Kolmogorov 方程**：走 $m+n$ 步從 i 到 j，等於「先走 m 步到某個中繼狀態 k、再走 n 步到 j」對所有 k 加總。

證明　對中繼時刻的狀態使用全機率定理，再用馬可夫性質丟掉多餘的條件：

$$\mathbb{P}(X_{m+n}=j \mid X_0=i)=\sum_{k}\mathbb{P}(X_m=k \mid X_0=i)\,\mathbb{P}(X_{m+n}=j \mid X_m=k),$$

右式正是矩陣乘法 $\boldsymbol{P}^{(m)}\boldsymbol{P}^{(n)}$ 的 (i,j) 元素。取 $m=n-1$、$n=1$ 依序歸納，即得 $P_{ij}^{(n)}=(\boldsymbol{P}^n)_{ij}$。 ■

例 11.2　二步轉移的手算與詮釋

沿用天氣鏈，計算 $\boldsymbol{P}^2$，並解讀「今天晴、後天雨」的機率。

解　逐元素計算 $\boldsymbol{P}^2=\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}$：

$$\boldsymbol{P}^2=\begin{pmatrix}0.7\times0.7+0.3\times0.5 & 0.7\times0.3+0.3\times0.5\\ 0.5\times0.7+0.5\times0.5 & 0.5\times0.3+0.5\times0.5\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0.64 & 0.36\\ 0.60 & 0.40\end{pmatrix},$$

每列和仍為 1——隨機矩陣的乘積仍是隨機矩陣。「今天晴、後天雨」$=(\boldsymbol{P}^2)_{12}=0.36$，路徑驗證：晴 → 晴 → 雨貢獻 $0.7\times0.3=0.21$，晴 → 雨 → 雨貢獻 $0.3\times0.5=0.15$，合計 0.36。✓ 矩陣乘法自動列舉並加總所有中繼路徑——這正是 Chapman–Kolmogorov 方程在做的事。

常見陷阱

馬可夫性是假設，不是事實。真實過程很少嚴格無記憶：語言有長程依賴、股價有動量、天氣有季節。用馬可夫鏈建模是**選擇**忽略較長的記憶以換取可解性；補救之道是**擴充狀態**——把「最近 k 期」整包當成一個狀態，k 階記憶就化為一階馬可夫（練習 11.3）。另一個技術性陷阱：本書約定分布為**列向量**、**右乘** $\boldsymbol{P}$，有些書用行向量左乘 $\boldsymbol{P}^{\mathsf{T}}$——讀文獻先確認「列和為 1 還是行和為 1」。

11.3　穩態分布與收斂

把分布一步步往前推：$\boldsymbol{\pi}_0,\ \boldsymbol{\pi}_0\boldsymbol{P},\ \boldsymbol{\pi}_0\boldsymbol{P}^2,\dots$ 這串向量最終會走向哪裡？對「行為良好」的鏈，答案出奇地乾淨：不論起點為何，分布都收斂到同一個極限。這個極限就是穩態分布。

定義 11.4　穩態分布

狀態上的機率分布 $\boldsymbol{\pi}$（列向量，$\pi_i\ge0$、$\sum_i\pi_i=1$）若滿足

$$\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{\pi},$$

則稱為**穩態分布**（stationary distribution，也稱不變分布）。它是轉移的**不動點**：分布一旦是 $\boldsymbol{\pi}$，經過任意多步轉移仍是 $\boldsymbol{\pi}$。線性代數的觀點：$\boldsymbol{\pi}$ 是 $\boldsymbol{P}$ 對應**特徵值 1 的左特徵向量**（即 $\boldsymbol{P}^{\mathsf{T}}$ 的特徵向量）正規化成總和為 1；特徵值 1 必定存在，因為每列和為 1 使全 1 向量成為右特徵向量。

「處於穩態」不代表鏈停止移動：個別軌跡照樣跳動，是**分布**不再改變——每個狀態流出的機率恰被流入補回。

例 11.3　天氣鏈的穩態分布：手算

求天氣鏈 $\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 0.7 & 0.3 \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}$ 的穩態分布。

解　設 $\boldsymbol{\pi} = [\pi_1, \pi_2]$。條件 $\boldsymbol{\pi P} = \boldsymbol{\pi}$ 展開成 $0.7\pi_1 + 0.5\pi_2 = \pi_1$ 與 $0.3\pi_1 + 0.5\pi_2 = \pi_2$——兩條都化簡為同一條 $0.3\,\pi_1 = 0.5\,\pi_2$（機率守恆使方程組必然降一階），必須補上正規化條件 $\pi_1 + \pi_2 = 1$。由 $\pi_1 = \frac{5}{3}\pi_2$ 代入：

$$\tfrac{5}{3}\pi_2 + \pi_2 = 1 \quad \Longrightarrow \quad \pi_2 = \tfrac{3}{8}, \qquad \pi_1 = \tfrac{5}{8}.$$

所以 $\boldsymbol{\pi} = \left[\frac{5}{8}, \frac{3}{8}\right] = [0.625,\ 0.375]$：長期而言，這座城市 62.5% 的日子是晴天。驗算：$[0.625, 0.375]\,\boldsymbol{P} = [0.4375 + 0.1875,\ 0.1875 + 0.1875] = [0.625, 0.375]$。✓

穩態分布回答「長期比例」，但還有一個更深的問題：從任意起點出發，分布真的會**收斂**到 $\boldsymbol{\pi}$ 嗎？先看數值證據。

例 11.4　收斂的數值示範：鏈忘記它的起點

分別從「確定晴天」$\boldsymbol{\pi}_0 = [1, 0]$ 與「確定雨天」$\boldsymbol{\pi}_0 = [0, 1]$ 出發，反覆右乘 $\boldsymbol{P}$。

解　反覆右乘 $\boldsymbol{P}$（如 $[1,0]\,\boldsymbol{P} = [0.7, 0.3]$，$[0.7, 0.3]\,\boldsymbol{P} = [0.64, 0.36]$，……），兩個起點的演化如下：

	起點 $\boldsymbol{\pi}_0 = [1, 0]$（確定晴）		起點 $\boldsymbol{\pi}_0 = [0, 1]$（確定雨）	
t	$\mathbb{P}$(晴)	$\mathbb{P}$(雨)	$\mathbb{P}$(晴)	$\mathbb{P}$(雨)
0	1.00000	0.00000	0.00000	1.00000
1	0.70000	0.30000	0.50000	0.50000
2	0.64000	0.36000	0.60000	0.40000
3	0.62800	0.37200	0.62000	0.38000
5	0.62512	0.37488	0.62480	0.37520
10	0.62500	0.37500	0.62500	0.37500

不論從哪裡出發，$t = 10$ 時分布與 $[0.625, 0.375]$ 已相差不到 10^{-6}——鏈徹底**忘記**了初始條件。而且差距每步縮小為 0.2 倍（晴的機率誤差：$0.075 \to 0.015 \to 0.003 \to \cdots$）；這個 0.2 正是 $\boldsymbol{P}$ 的第二特徵值，收斂以 $|\lambda_2|^t$ 的幾何速度進行（練習 11.4）。

收斂並非理所當然——它需要鏈「行為良好」。良好與否由兩個結構性質決定。

定義 11.5　不可約與非週期

不可約（irreducible）：任兩狀態 i, j 都存在某個 n 使 $(\boldsymbol{P}^n)_{ij} > 0$——從任何狀態出發，終能以正機率到達任何其他狀態；鏈不會被困在某個角落。

週期（period）：狀態 i 的週期為 $d(i) = \gcd\{n \geq 1 : (\boldsymbol{P}^n)_{ii} > 0\}$，即所有「可能返回時刻」的最大公因數。若所有狀態的週期都是 1，鏈稱為**非週期**（aperiodic）。實用判準：只要某狀態有自環（$P_{ii} > 0$）且鏈不可約，整條鏈就非週期（不可約鏈的所有狀態必同週期）。

定理 11.6　馬可夫鏈收斂定理

有限狀態馬可夫鏈若**不可約且非週期**，則：

1. 穩態分布 $\boldsymbol{\pi}$ 存在、唯一，且每個分量 $\pi_j > 0$；
2. 對**任意**初始分布 $\boldsymbol{\pi}_0$，都有 $\boldsymbol{\pi}_0 \boldsymbol{P}^t \to \boldsymbol{\pi}$（$t \to \infty$）；等價地，$\boldsymbol{P}^t$ 的每一列都收斂到 $\boldsymbol{\pi}$；
3.（遍歷性）沿單一軌跡統計的長期停留頻率也收斂：$\frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} \mathbf{1}\{X_t = j\} \to \pi_j$（機率 1 成立）。「時間平均 = 空間平均」：看一條夠長的路徑，等於看整個分布。

證明超出本書範圍（標準工具是耦合論證或 Perron–Frobenius 定理），但直觀不難：不可約保證鏈走得遍全空間，非週期排除固定節拍的振盪，初始差異便被隨機性逐步抹平。

核心觀念

「忘記起點」是可以拿來用的魔法。行為良好的鏈跑久了，X_t 的分布就是 $\boldsymbol{\pi}$，與起點無關。這件事有兩個改變世界的用法：**PageRank** 從「隨機網頁漫遊者」鏈讀出穩態分布，作為網頁的重要性分數；**MCMC**（第 11.5 節）反向操作——先指定你**想要**的目標分布，再**設計**一條以它為穩態的鏈，跑得夠久，鏈的狀態就是目標分布的樣本。一個是「從鏈讀出分布」，一個是「為分布造一條鏈」，用的是同一條定理。

常見陷阱

穩態存在 $\neq$ 分布收斂。週期鏈 $\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ 有唯一穩態 $[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$，分布卻永遠在 $[1, 0]$ 與 $[0, 1]$ 間振盪；可約鏈則會讓極限依賴起點（練習 11.6）。使用「跑久了就是 $\boldsymbol{\pi}$」之前，先檢查不可約與非週期——在 MCMC 的語境下，這是演算法設計者要負責保證的事。

PageRank：兆元等級的穩態分布

Google 早期的核心演算法 PageRank 把網際網路看成馬可夫鏈：狀態是網頁，「隨機漫遊者」在目前網頁的對外連結中等機率挑一條點下去。穩態分布 π_j 是長期停留在網頁 j 的時間比例——即重要性分數：重要的頁被造訪得頻繁、每一票更有分量。這個遞迴定義，數學上恰是 $\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\pi}$。

例 11.5　三頁迷你網路的 PageRank

一個只有三頁的網路：頁 A 連向 B 與 C；頁 B 連向 C；頁 C 連向 A。漫遊者在對外連結中等機率選擇。求穩態分布，並解讀排名。

解　狀態順序 (A, B, C)。A 有兩條對外連結（各 $\frac{1}{2}$），B、C 各只有一條（機率 1）：

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

解 $\boldsymbol{\pi P} = \boldsymbol{\pi}$（逐行寫出「流入 = 存量」）：$\pi_A = \pi_C$、$\pi_B = \frac{1}{2}\pi_A$、$\pi_C = \frac{1}{2}\pi_A + \pi_B$，第三條由前兩條自動滿足。補上正規化 $\pi_A + \pi_B + \pi_C = 1$：

$$\pi_A + \tfrac{1}{2}\pi_A + \pi_A = \tfrac{5}{2}\pi_A = 1 \quad \Longrightarrow \quad \boldsymbol{\pi} = \left[\tfrac{2}{5},\ \tfrac{1}{5},\ \tfrac{2}{5}\right] = [0.4,\ 0.2,\ 0.4].$$

收斂前提成立：$A \to B \to C \to A$ 使鏈不可約；返回 A 可走 2 步（$A \to C \to A$）或 3 步，$\gcd(2, 3) = 1$，非週期。解讀：C 有兩條入鏈，分數 0.4 不意外；有趣的是 **A 只有一條入鏈卻並列第一**——那條入鏈來自重要的 C，且 C 把全部的票都投給了 A。PageRank 衡量的不是入鏈數量，而是加權後的重要性流。實務上還會混入**阻尼**（damping）：漫遊者以機率 $1 - d \approx 0.15$ 隨機傳送到任意頁，確保不可約且非週期（練習 11.8）。

11.4　蒙地卡羅方法

暫時把鏈放下，先解決另一個問題：**怎麼計算期望值？**貝氏推論、統計物理、財務工程裡的期望值往往是高維積分，沒有閉式解。蒙地卡羅方法的答案樸素而深刻：抽樣，然後取平均。

定義 11.7　蒙地卡羅估計

要估計 $\mu = \mathbb{E}[g(X)]$（$X \sim p$），**蒙地卡羅方法**（Monte Carlo method）抽取 $X_1, \dots, X_N \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} p$，以樣本平均

$$\hat{\mu}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} g(X_i)$$

作為估計。大數法則（第 6 章）保證 $\hat{\mu}_N \to \mu$；估計不偏，標準誤為 $\mathrm{SE}(\hat{\mu}_N) = \sigma_g / \sqrt{N}$（$\sigma_g^2 = \mathrm{Var}(g(X))$），中央極限定理再給出近似信賴區間 $\hat{\mu}_N \pm 1.96\, \hat{\sigma}_g / \sqrt{N}$。

任何機率都是期望值（$\mathbb{P}(A) = \mathbb{E}[\mathbf{1}_A]$），任何積分都能寫成期望值（$\int_0^1 g(x)\,\mathrm{d}x = \mathbb{E}[g(U)]$，$U$ 為均勻分布），所以「抽樣 + 平均」是一把通用鑰匙。

核心觀念

蒙地卡羅的誤差律 $\mathrm{SE} = \sigma/\sqrt{N}$ **完全不依賴問題的維度**。把 $[0,1]^{20}$ 上的積分交給格點法，每維取 10 點就要 10^{20} 次函數求值；蒙地卡羅照樣抽一百萬個點，誤差照樣以 $1/\sqrt{10^6}$ 的尺度縮小。代價是慢：多一位小數要 100 倍樣本。「慢，但對維度免疫」——它成為高維機率計算主力的原因（練習 11.11）。

例 11.6　蒙地卡羅估計圓周率

在單位正方形 $[0,1]^2$ 內均勻撒 N 個點。四分之一圓盤 $\{x^2+y^2 \le 1\}$ 的面積是 $\pi/4$，故每個點落入的機率為 $p = \pi/4$。以 $\hat\pi = 4 \times (\text{落入圓內的點數})/N$ 估計 π。這個估計有多準？

解　落點指示變數是 $\mathrm{Bernoulli}(p)$，$p = \pi/4 \approx 0.7854$，變異數 $p(1-p) \approx 0.1686$，故 $\mathrm{SE}(\hat\pi) = 4\sqrt{p(1-p)/N} \approx 1.64/\sqrt{N}$：$N = 10^4$ 時約 0.016、$N = 10^6$ 時約 0.0016。想多抓一位小數，N 得乘 100——$1/\sqrt{N}$ 誤差律的日常長相。第 11.7 節會實際跑出 $\hat\pi \approx 3.14$。

但這有個致命前提：蒙地卡羅需要**能從 p 抽樣**。均勻、常態當然沒問題，可是貝氏推論交出的後驗分布（第 9 章）長這樣：

$$p(\theta \mid \text{資料}) = \frac{\text{概似} \times \text{先驗}}{Z}, \qquad Z = \int \text{概似} \times \text{先驗}\, \mathrm{d}\theta,$$

分子逐點可算，分母 Z（證據，evidence）卻是常常算不動的高維積分——我們只知道分布「**到比例常數為止**」。沒有 Z，連密度都寫不全，遑論抽樣。怎麼辦？讓馬可夫鏈登場。

11.5　馬可夫鏈蒙地卡羅（MCMC）

定義 11.8　馬可夫鏈蒙地卡羅

馬可夫鏈蒙地卡羅（Markov chain Monte Carlo, MCMC）不直接從目標分布 p 抽獨立樣本，而是**建構一條穩態分布恰為 p 的馬可夫鏈**，模擬它的軌跡 $X_0, X_1, X_2, \ldots$，把軌跡上的狀態當作 p 的（**相關的**）樣本。收斂定理的第 3 款（遍歷性）保證：只要鏈行為良好，$\frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} g(X_t) \to \mathbb{E}_p[g]$——時間平均照樣能當期望值用，即使樣本彼此相關、即使我們從不知道 Z。

問題化約為：**給定目標 p，怎麼設計一條以 p 為穩態的鏈？**直接解 $\boldsymbol{\pi P} = \boldsymbol{\pi}$ 是全域條件，難以下手；實務上用一個更強、但逐對可驗證的局部條件。

定義 11.9　細緻平衡

分布 $\boldsymbol{\pi}$ 與轉移矩陣 $\boldsymbol{P}$ 滿足**細緻平衡**（detailed balance），若對**每一對**狀態 i, j：

$$\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}.$$

左邊是穩態下每步「從 i 流向 j」的機率流量，右邊是反向流量：細緻平衡要求**每一對狀態之間的雙向流量各自打平**。滿足細緻平衡的鏈稱為**可逆**（reversible）——影片正著放、倒著

放，統計性質相同。

命題 11.10　細緻平衡 ⇒ 穩態

若 $\boldsymbol{\pi}$ 是機率分布且與 $\boldsymbol{P}$ 滿足細緻平衡，則 $\boldsymbol{\pi P}=\boldsymbol{\pi}$，即 $\boldsymbol{\pi}$ 是穩態分布。

證明　對任意狀態 j：

$$(\boldsymbol{\pi P})_j=\sum_i \pi_i P_{ij}=\sum_i \pi_j P_{ji}=\pi_j\sum_i P_{ji}=\pi_j\times 1=\pi_j,$$

第二個等號逐項使用細緻平衡，最後用了「每列和為 1」。 ■

細緻平衡是**充分而非必要**條件：穩態只要求每個狀態的**總**流入等於總流出（全域平衡），細緻平衡額外要求逐對打平。「總量平衡但逐對單向循環」的鏈確實存在——練習 11.7 會用一條循環鏈完整驗證。

例 11.7　細緻平衡的驗證

驗證天氣鏈與其穩態 $\boldsymbol{\pi}=[\frac{5}{8},\frac{3}{8}]$ 滿足細緻平衡。

解　兩狀態只需檢查一對：$\pi_1P_{12}=\frac{5}{8}\times 0.3=0.1875$，$\pi_2P_{21}=\frac{3}{8}\times 0.5=0.1875$。✓ 雙向流量打平，天氣鏈可逆。（事實上任何兩狀態鏈對其穩態都自動滿足細緻平衡——流量只有一對，總平衡就是逐對平衡。）

Metropolis–Hastings 演算法

Metropolis 演算法（1953 年出身於洛沙拉摩斯，1970 年由 Hastings 推廣）用「提議—裁決」迴圈把細緻平衡變成通用抽樣引擎，只需要兩樣東西：能逐點計算的未正規化密度 $\tilde{p}$，與容易抽樣的提議分布。

定義 11.11　Metropolis–Hastings 演算法

目標 $p(x)=\tilde{p}(x)/Z$（只需能算 $\tilde{p}$，Z 可未知）。選一個**提議分布**（proposal distribution）$q(x'\mid x)$，如以現址為中心的常態「隨機漫步提議」$x'\sim\mathcal{N}(x,s^2)$。由任意 x_0 出發，重複：

1. **提議**：從 $q(\cdot\mid x_t)$ 抽出候選點 x'；
2. **計算接受機率**：

$$\alpha=\min\Big(1,\ \frac{\tilde{p}(x')\,q(x_t\mid x')}{\tilde{p}(x_t)\,q(x'\mid x_t)}\Big)\overset{\text{對稱提議}}{=}\min\Big(1,\ \frac{\tilde{p}(x')}{\tilde{p}(x_t)}\Big);$$

3. **裁決**：抽 $U\sim\mathrm{Unif}(0,1)$；$U\le\alpha$ 則**接受**（$x_{t+1}=x'$），否則**拒絕並留在原地**（$x_{t+1}=x_t$，重複值照樣記入樣本）。

提議對稱（$q(x'\mid x)=q(x\mid x')$）的特例稱為 **Metropolis 演算法**。

核心觀念

Metropolis–Hastings 的高明之處：你永遠不需要正規化常數。接受機率只依賴比值 $p(x')/p(x_t) = \frac{\tilde p(x')/Z}{\tilde p(x_t)/Z} = \tilde p(x')/\tilde p(x_t)$——難算的 Z 上下消掉了。這讓完整的貝氏推論變得可行：後驗 $\propto$ 概似 $\times$ 先驗——恰好是第 9 章「算得出分子、算不出分母」的處境——如今可以直接抽樣。實作時取對數，用 $\log U < \log \tilde p(x') - \log \tilde p(x_t)$ 裁決，避免高維密度的數值下溢。

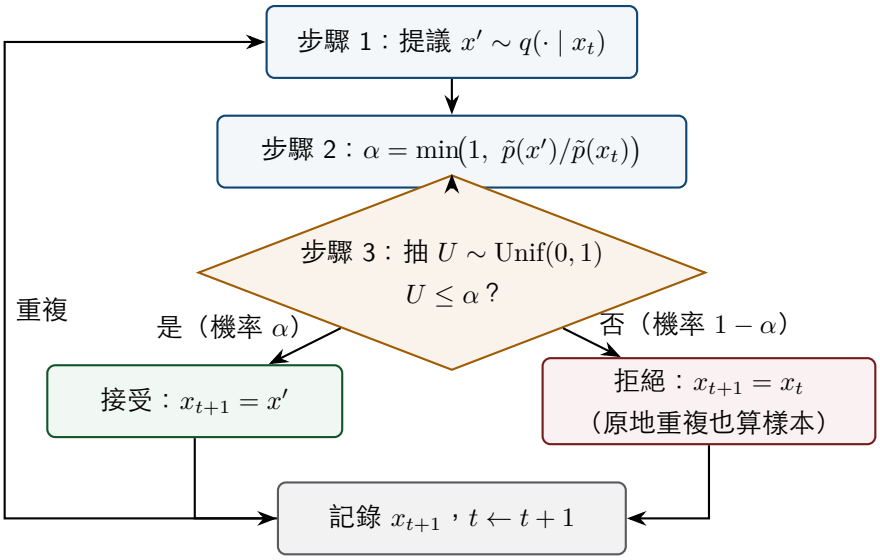


圖 11.2: Metropolis–Hastings 的一步（對稱提議版）：提議、算比值、擲骰裁決。往高密度必被接受、往低密度偶被接受——長期停留時間便正比於密度。

例 11.8　接受機率的手算

目標為未正規化密度 $\tilde p(x) = e^{-x^2/2}$（即標準常態，略去 $1/\sqrt{2\pi}$），提議對稱。目前位於 $x_t = 1.0$。

(a) 提議 $x' = 1.8$：接受機率為何？若裁決時抽到 $U = 0.41$，鏈怎麼走？

(b) 提議 $x' = 0.4$：接受機率為何？

解　(a) 比值只需要指數部分：

$$\alpha = \min\Big(1,\ \frac{e^{-1.8^2/2}}{e^{-1.0^2/2}}\Big) = \min\big(1,\ e^{-(1.62-0.5)}\big) = e^{-1.12} \approx 0.326.$$

抽到 $U = 0.41 > 0.326$：**拒絕**，$x_{t+1} = 1.0$——鏈原地停留，樣本序列裡 1.0 再記一次。重複值不是浪費：它正是「密度高處要多待」的機制。

(b) $x' = 0.4$ 的密度更高：$\tilde p(0.4)/\tilde p(1.0) = e^{-(0.08-0.5)} = e^{0.42} \approx 1.52 \ge 1$，故 $\alpha = 1$，**必定接受**。規則的全貌：往高密度走免審核，往低密度走要抽籤，籤的難度正比於密度落差——長期下來，鏈在各區域的停留時間便與機率成正比。

定理 11.12　Metropolis–Hastings 的正確性

MH 演算法產生的馬可夫鏈與目標分布 p 滿足細緻平衡，因此 p 是該鏈的穩態分布；若提議分布使鏈不可約且非週期（常態隨機漫步提議即滿足），軌跡的時間平均便收斂到 $\mathbb{E}_p[g]$。

證明　對 $x \neq x'$，實際走到 x' 必須「提議它」且「接受它」，故轉移密度為 $K(x \to x') = q(x' \mid x)\,\alpha(x, x')$。以對稱提議計算機率流量：

$$p(x)\,K(x \to x') = q(x' \mid x)\,p(x)\,\min\!\Big(1, \frac{p(x')}{p(x)}\Big) = q(x' \mid x)\,\min\big(p(x),\ p(x')\big),$$

最右式在對調 $x \leftrightarrow x'$ 之下不變（提議對稱），故恰等於 $p(x')\,K(x' \to x)$——細緻平衡成立，由「細緻平衡 $\Rightarrow$ 穩態」即得結論；全程只用到比值 $p(x')/p(x) = \tilde{p}(x')/\tilde{p}(x)$，$Z$ 從未出場。非對稱提議用 Hastings 修正後，流量式變成 $\min\big(p(x)\,q(x' \mid x),\ p(x')\,q(x \mid x')\big)$，依然對稱。 ■

直觀理解

把 MH 想成「尊重地形的隨機漫步」：上坡（$\tilde{p}$ 變大）一律放行，下坡以新舊密度比的機率放行，於是漫步者自然聚集在高密度區、偶爾探訪低密度區，出沒頻率恰好正比於 p。妙處在於決策只用**局部**資訊（兩點的密度比），不需要全域地圖（Z）。

Gibbs 抽樣：逐座標的 MCMC

高維目標 $p(x_1, \ldots, x_d)$ 有時整體難抽，但「固定其他座標、只看一個座標」的條件分布卻是熟面孔（常態、Beta、Gamma……）——Gibbs 抽樣專吃這種結構。

定義 11.13　Gibbs 抽樣

Gibbs 抽樣（Gibbs sampling）對目標 $p(x_1, \ldots, x_d)$ 輪流更新每個座標：在第 t 輪，依序對 $i = 1, \ldots, d$

$$x_i^{(t+1)} \sim p\big(x_i \mid x_1^{(t+1)}, \ldots, x_{i-1}^{(t+1)},\ x_{i+1}^{(t)}, \ldots, x_d^{(t)}\big),$$

即從「給定**目前**其他所有座標值」的**完整條件分布**（full conditional）抽新值。Gibbs 是 MH 的特例：把完整條件分布當提議，接受機率恆為 1——每一步都被接受，沒有浪費的提議。

例如二元常態目標（相關係數 ρ）的兩個條件分布都是一維常態（第 5 章）：$X \mid Y = y \sim \mathcal{N}(\rho y, 1 - \rho^2)$、$Y \mid X = x \sim \mathcal{N}(\rho x, 1 - \rho^2)$；交替抽這兩個一維常態，就能產生二維聯合分布的樣本（練習 11.9）。共軛結構豐富的貝氏階層模型，正是 Gibbs 的主場。

常見陷阱

MCMC 樣本不是 $\overset{\text{i.i.d.}}{\sim}$ 樣本——別直接套第 6–8 章的公式。三件事必須放在心上：

- **burn-in（暖身期）**：前段軌跡帶著起點的偏見（尚未收斂到穩態），慣例把開頭一段（如前 10%）整段丟棄。
- **自相關**：相鄰樣本高度相關，T 個 MCMC 樣本只相當於 $T_{\text{eff}} < T$ 個獨立樣本（有效

樣本數，effective sample size）；標準誤要用 T_{eff} 算，否則高估精度。

- **混合（mixing）診斷**：鏈可能困在某個峰附近，看似收斂實則只探索半張地圖；實務上看軌跡圖（trace plot）、跑多條不同起點的鏈互相比對（$\hat{R}$ 統計量）。

MCMC 給的是「終究正確」的保證，不是「立刻正確」——鏈要跑得夠久，而「夠久」需要診斷來背書。

11.6 馬可夫鏈與蒙地卡羅如何貫穿機器學習

貝氏機器學習的古典引擎。後驗 $\propto$ 概似 $\times$ 先驗、證據積分算不動的困境（第 9 章），由 MCMC 正面解決：對後驗抽樣，用樣本回答一切問題。機率程式語言（PyMC、Stan）的核心是進化版 MCMC——哈密頓蒙地卡羅（HMC）用密度的**梯度**引導提議，骨架仍是「提議—裁決」。

序列建模的原點。神經網路之前，n-gram 模型統治語言建模數十年：bigram 是詞彙表上的馬可夫鏈，轉移機率由語料計數估計（練習 11.10）。大型語言模型是這條路的延伸：固定上下文窗之內，它是**狀態空間巨大無比的高階馬可夫鏈**，逐詞抽樣生成文字就是沿學到的鏈漫步。而**強化學習**（reinforcement learning）把環境形式化為**馬可夫決策過程**（Markov decision process, MDP）：狀態、行動、轉移機率 $\mathbb{P}(s' \mid s, a)$ 與獎勵；固定策略後 MDP 塌縮成馬可夫鏈，貝爾曼方程能遞迴拆解長期報酬，靠的正是馬可夫性質。

擴散模型：馬可夫鏈的華麗現身。當今領先的圖像生成器——擴散模型（diffusion model）——**就是**馬可夫鏈。前向鏈把資料一步步加上高斯雜訊：

$$X_t = \sqrt{1-\beta_t}\, X_{t-1} + \sqrt{\beta_t}\, \varepsilon_t, \qquad \varepsilon_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \boldsymbol{I}),$$

每步只依賴上一步——如假包換的馬可夫轉移，走幾百步後圖片化為純雜訊；神經網路學的是**反向鏈**——從雜訊出發、一步步去噪。生成一張圖，就是把反向鏈完整跑一遍。

這如何驅動機器學習／ AI

馬可夫鏈與蒙地卡羅遍布現代 AI 的地基。**MCMC** 是貝氏機器學習的古典引擎，凡後驗沒有閉式解，就靠它抽樣。**馬可夫鏈**建模一切序列：n-gram 模型是詞彙上的馬可夫鏈，強化學習把世界形式化為馬可夫決策過程（MDP）。最驚人的是**擴散模型**——前向鏈逐步加噪、學到的反向鏈逐步去噪——生成一張圖片就是跑一條馬可夫鏈。而不論擴散還是自迴歸模型（autoregressive model），「抽樣生成」這件事本身，就是在學到的機率分布上做**蒙地卡羅漫步**。你在本章學的不是屠龍之技，而是生成式 AI 每天在做的事的數學名字。

11.7 Python 實作

動手驗證本章的關鍵論斷：穩態分布的特徵向量解法、長期停留頻率、蒙地卡羅估 π，以及 Metropolis–Hastings 抽樣。

```
import numpy as np
```

```
rng = np.random.default_rng(42)

# --- 1. 天氣鏈：列 = 現在狀態（0 晴，1 雨），行 = 下一狀態 ---
P = np.array([[0.7, 0.3],
              [0.5, 0.5]])

# --- 2. 穩態分布 = P 轉置的特徵值 1 特徵向量（左特徵向量）---
eigvals, eigvecs = np.linalg.eig(P.T)
idx = np.argmin(np.abs(eigvals - 1.0))   # 找特徵值最接近 1 者
pi = np.real(eigvecs[:, idx])
pi = pi / pi.sum()                       # 正規化成機率分布
print(pi)                                # -> [0.625 0.375]
print(pi @ P)                            # -> [0.625 0.375]（不動點驗證）

# --- 3. 遍歷性：單一長軌跡的停留頻率也趨向穩態 ---
T = 200_000
state, visits = 0, np.zeros(2)
for _ in range(T):
    state = rng.choice(2, p=P[state])    # 依目前狀態那一列轉移
    visits[state] += 1
print(visits / T)                        # -> 約 [0.625 0.375]
```

特徵向量解與單一軌跡的停留頻率殊途同歸——收斂定理的數值化身。接著是蒙地卡羅與 MH。

```
# --- 4. 蒙地卡羅估計 pi：四分之一圓的落點比例 ---
N = 1_000_000
pts = rng.random((N, 2))                 # 單位正方形內均勻撒點
inside = (pts ** 2).sum(axis=1) <= 1.0
print(4 * inside.mean())                 # -> 約 3.1416（誤差 ~ 0.0016）

# --- 5. Metropolis-Hastings：從未正規化目標 exp(-x^2/2) 抽樣 ---
def log_p(x):                            # 只需要對數密度，差一個常數無妨
    return -0.5 * x ** 2

n_steps, step = 100_000, 1.0
samples = np.empty(n_steps)
x, n_accept = 3.0, 0                     # 故意從尾巴出發，觀察 burn-in
for t in range(n_steps):
    x_new = x + step * rng.normal()      # 對稱提議：高斯隨機漫步
    if np.log(rng.random()) < log_p(x_new) - log_p(x):
        x, n_accept = x_new, n_accept + 1
    samples[t] = x                       # 拒絕時重複記錄原值
```

```

kept = samples[2_000:]                  # 丟掉前 2000 步暖身期
print(n_accept / n_steps)               # -> 接受率約 0.70
print(kept.mean(), kept.std())          # -> 約 0.0 與 1.0
```

從未寫下正規化常數 $1/\sqrt{2\pi}$，保留樣本的均值 ≈ 0、標準差 ≈ 1——標準常態的指紋。起點 $x_0 = 3.0$ 在目標尾巴上，前幾百步明顯偏高，正是要丟暖身期的原因；步長的權衡見練習 11.12。

本章總結

- **隨機過程**是以時間為索引的一族隨機變數 $\{X_t\}$；一次實現是一條樣本路徑，新挑戰是**相依性**。
- **馬可夫性質**：未來只透過現在依賴過去——現在的狀態總結全部相關歷史。這是建模假設，換來 $\boldsymbol{\pi}_{t+1} = \boldsymbol{\pi}_t \boldsymbol{P}$：一個矩陣抓住整個動力學，$n$ 步轉移就是 $\boldsymbol{P}^n$。
- **穩態分布**解 $\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\pi}$（特徵值 1 的左特徵向量）。**不可約 + 非週期**的鏈有唯一穩態，不論起點都收斂到它，長期停留頻率亦然（遍歷性）——PageRank 即「隨機漫遊者」鏈的穩態分布。
- **蒙地卡羅**用抽樣平均估計期望，誤差 $\sigma/\sqrt{N}$ **與維度無關**——高維積分的主力。
- **MCMC** 造一條以目標為穩態的鏈：**Metropolis–Hastings** 的接受機率只用密度**比值**，正規化常數消失，使貝氏後驗抽樣可行；**Gibbs 抽樣**輪流抽完整條件分布，是接受率恆為 1 的 MH 特例。
- **細緻平衡**（$\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}$）是穩態的充分非必要條件，也是 MH 正確性的來源；MCMC 樣本**相關且需暖身**——丟 burn-in、關注有效樣本數與混合診斷。
- 馬可夫鏈與蒙地卡羅貫穿 AI：n-gram 與語言模型、強化學習的 MDP、擴散模型的前向 / 反向鏈——生成式模型的「抽樣」就是在學到的分布上做蒙地卡羅漫步。

11.8 練習題

建議先獨立完成再對照詳解；標「程式」者需動手寫程式。

練習 11.1 (基礎)　兩家電信公司 A 與 B 瓜分市場。每年 A 的客戶有 80% 續留、20% 跳槽到 B；B 的客戶有 70% 續留、30% 跳槽到 A。(a) 以「當年所屬公司」為狀態寫出轉移矩陣 $\boldsymbol{P}$，並驗證每列和為 1。(b) 這個模型的馬可夫假設在說什麼？請用一句話說明它可能失真之處。(c) 某客戶今年在 A，求兩年後仍在 A 的機率（請用路徑分解與矩陣平方各算一次）。

練習 11.2 (基礎)　沿用天氣鏈 $\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 0.7 & 0.3 \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}$（狀態 1 晴、狀態 2 雨）。今天下雨。(a) 求後天（兩天後）下雨的機率，用「列出所有兩步路徑」與「計算 $(\boldsymbol{P}^2)_{22}$」兩種方法互相驗證。(b) 求三天後下雨的機率。

練習 11.3 (基礎)　設 $X_1, X_2, \ldots$ 為 $\overset{\text{i.i.d.}}{\sim}$ 公正硬幣（正面 $=1$、反面 $=0$）。判斷下列過程是否為馬可夫鏈，並證明或說明：(a) 累積正面數 $S_t = X_1 + \cdots + X_t$；(b) 移動平均 $Y_t = (X_t + X_{t-1})/2$（提示：比較 $\mathbb{P}(Y_{t+1} = 1 \mid Y_t = \tfrac{1}{2})$ 與 $\mathbb{P}(Y_{t+1} = 1 \mid Y_t = \tfrac{1}{2}, Y_{t-1} = 1)$）；(c) 若某過程的明天依賴「今天與昨天」兩天的狀態（二階記憶），要怎麼把它改造成馬可夫鏈？以兩種天氣為例，新的狀態空間有幾個狀態？

練習 11.4 (進階)　考慮一般的兩狀態鏈 $\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 1-p & p \\ q & 1-q \end{pmatrix}$，$0 < p + q < 2$。(a) 解 $\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\pi}$，證明穩態分布為 $\boldsymbol{\pi} = \left[\frac{q}{p+q}, \frac{p}{p+q}\right]$。(b) 代入天氣鏈（$p = 0.3$、$q = 0.5$）驗證前文的答案。(c) 用「特徵值之和 $=$ 跡、之積 $=$ 行列式」求 $\boldsymbol{P}$ 的兩個特徵值，說明第二特徵值如何控制收斂速度，並算出天氣鏈的收斂倍率。(d) $p = q = 1$ 時會發生什麼事？

練習 11.5 (進階)　一部機器每天處於三種狀態之一：正常（G）、老化（W）、故障（F）。動力學：正常的機器隔天 90% 仍正常、10% 進入老化；老化的機器隔天 70% 維持老化、30% 故障；故障的機器當天送修，隔天必定回到正常。(a) 寫出轉移矩陣。(b) 求穩態分布（以分數表示）。(c) 長期而言，機器有多少比例的日子處於故障狀態？

練習 11.6 (進階)　判斷下列兩條鏈是否滿足收斂定理的條件，並描述 $\boldsymbol{\pi}_t$ 的長期行為。(a) $\boldsymbol{P}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$：檢查不可約與週期性、求穩態，從 $\boldsymbol{\pi}_0 = [1, 0]$ 出發算 $\boldsymbol{\pi}_1, \boldsymbol{\pi}_2, \boldsymbol{\pi}_3$，分布收斂嗎？(b) $\boldsymbol{P}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}$：檢查不可約性、求穩態，從 $\boldsymbol{\pi}_0 = [0, 1]$ 出發求 $\boldsymbol{\pi}_t$ 的一般式與極限。(c) 收斂定理的哪個條件各自失效？結局有何不同？

練習 11.7 (挑戰)　(a) 證明：若機率分布 $\boldsymbol{\pi}$ 與轉移矩陣 $\boldsymbol{P}$ 滿足細緻平衡 $\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}$（對所有 i, j），則 $\boldsymbol{\pi}$ 是穩態分布。(b) 驗證循環鏈 $\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ 以均勻分布為穩態，卻不滿足細緻平衡——結論：細緻平衡是穩態的充分非必要條件。(c) 用「機率流量」的語言解釋 (a) 與 (b) 的差異：細緻平衡要求什麼？穩態只要求什麼？

練習 11.8 (挑戰)　三頁網路：A 連向 B；B 連向 A；C 連向 A（C 沒有任何入鏈）。採用含阻尼的 PageRank：$\mathrm{PR}(i)=\frac{1-d}{3}+d\sum_{j:j\to i}\mathrm{PR}(j)/L(j)$，其中 $L(j)$ 為頁 j 的對外連結數，阻尼係數 $d=0.85$。(a) 寫出三頁的方程組。(b) 解出三頁的 PageRank 分數（保留四位小數），並驗證總和為 1。(c) 說明為何 $\mathrm{PR}(C)$ 恰為 $(1-d)/3$；若把 d 設為 1（無阻尼），這個網路會出什麼問題？(提示：檢查 A $\leftrightarrow$ B 子鏈的週期性與 C 的地位。)

練習 11.9 (進階)　目標分布為二元常態，兩座標的相關係數 $\rho=0.8$，邊際皆為標準常態。已知完整條件分布為 $X\mid Y=y\sim\mathcal{N}(0.8y,\,0.36)$ 與 $Y\mid X=x\sim\mathcal{N}(0.8x,\,0.36)$。(a) 寫出 Gibbs 抽樣的完整步驟（含初始化與迭代）。(b) 解釋「Gibbs 是接受機率恆為 1 的 MH 特例」的意義、好處與前提。(c) 當 $\rho\to 1$ 時，Gibbs 的表現會如何變化？為什麼？

練習 11.10 (基礎)　語料庫只有一句話：「我愛機率我愛統計」。(a) 用最大概似估計（即計數比例）建立 bigram 模型的轉移機率表。(b) 從「我」出發依鏈生成兩個詞，求生成出「我愛統計」的機率。(c) 說明為何 bigram 模型是馬可夫鏈；trigram 模型（下一詞依賴前兩詞）又如何納入馬可夫框架？

練習 11.11 (進階)　你用 N 次獨立模擬估計某事件的機率 $p\approx 0.2$。(a) $N=1000$ 時，估計的標準誤約是多少？(b) 想把標準誤縮小為原本的十分之一，需要多少樣本？(c) 已知 d 維的梯形法數值積分誤差階為 $N^{-2/d}$（N 為函數求值次數），蒙地卡羅為 $N^{-1/2}$：d 超過多少時蒙地卡羅的收斂階勝出？這對貝氏推論意味著什麼？

練習 11.12 (挑戰·程式)　(a) 模擬天氣鏈 200,000 步，統計兩狀態的停留頻率，與理論穩態 $[0.625, 0.375]$ 比較。(b) 實作 Metropolis–Hastings 抽樣未正規化目標 $\tilde{p}(x)=e^{-x^2/2}$（提議 $x'\sim\mathcal{N}(x_t,1)$），丟掉前 2000 步 burn-in，檢查樣本平均 ≈ 0、標準差 ≈ 1。(c) 把提議步長改為 0.05 與 50，記錄接受率並觀察樣本品質，解釋「步長太小」與「步長太大」各自的病徵。

11.9　練習題詳解

練習 11.1 詳解　(a) 狀態順序 (A,B)：

$$\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}0.8 & 0.2\\ 0.3 & 0.7\end{pmatrix},\qquad 0.8+0.2=1,\quad 0.3+0.7=1.\ \checkmark$$

(b) 馬可夫假設：明年的選擇**只**依賴今年所屬的公司，與更早的歷史無關。可能失真：「曾被 A 惹惱而離開」的客戶回流意願，可能低於從未用過 A 的客戶——歷史其實有影響，模型選擇忽略它。

(c) 路徑分解：A→A→A 貢獻 $0.8\times0.8=0.64$，A→B→A 貢獻 $0.2\times0.3=0.06$，合計 0.70。矩陣法：$(\boldsymbol{P}^2)_{11}=0.8\times0.8+0.2\times0.3=0.70$。✓

練習 11.2 詳解　(a) 路徑法：雨 → 雨 → 雨貢獻 $0.5\times0.5=0.25$，雨 → 晴 → 雨貢獻 $0.5\times0.3=0.15$，合計 0.40。矩陣法：由第 11.2 節例題 $\boldsymbol{P}^2=\begin{pmatrix}0.64 & 0.36\\ 0.60 & 0.40\end{pmatrix}$，讀出 $(\boldsymbol{P}^2)_{22}=0.40$。✓
(b) 取 $\boldsymbol{P}^3=\boldsymbol{P}^2\boldsymbol{P}$ 第 2 列第 2 行：$(\boldsymbol{P}^3)_{22}=0.60\times0.3+0.40\times0.5=0.38$。路徑驗算（四條三步路徑）：雨雨雨雨 0.125、雨雨晴雨 0.075、雨晴雨雨 0.075、雨晴晴雨 0.105，合計 0.38。✓ 數列 $0.5, 0.40, 0.38, \ldots$ 正逐步逼近穩態值 0.375。

練習 11.3 詳解　(a) **是馬可夫鏈。**$S_{t+1}=S_t+X_{t+1}$，而 X_{t+1} 與 $X_1,\ldots,X_t$ 獨立，故 $\mathbb{P}(S_{t+1}=s+1\mid S_t=s,\ \text{過去})=\mathbb{P}(X_{t+1}=1)=\frac12$，只依賴目前的 s。（狀態空間可數無限，馬可夫性照樣成立。）
(b) **不是馬可夫鏈。**依提示計算兩個條件機率。無額外歷史時：$Y_t=\frac12$ 表示 (X_{t-1},X_t) 為 $(0,1)$ 或 $(1,0)$，兩者等可能，故 $\mathbb{P}(Y_{t+1}=1\mid Y_t=\frac12)=\mathbb{P}(X_t=1\mid Y_t=\frac12)\times\mathbb{P}(X_{t+1}=1)=\frac12\times\frac12=\frac14$。加入 $Y_{t-1}=1$ 後：$Y_{t-1}=1$ 迫使 $X_{t-1}=1$，再由 $Y_t=\frac12$ 得 $X_t=0$，於是 $Y_{t+1}\le\frac12$，

$$\mathbb{P}(Y_{t+1}=1\mid Y_t=\tfrac12,\ Y_{t-1}=1)=0\neq\tfrac14.$$

更早的歷史改變了預測——馬可夫性不成立。直觀原因：Y_t 遺失了「哪一枚是正面」的資訊，而那正是預測 Y_{t+1} 需要的。
(c) **擴充狀態空間**：定義 $Z_t=(X_{t-1},X_t)$，把「最近兩天」整包當作新狀態——已知 Z_t 則明天的分布完全確定，$\{Z_t\}$ 是一階馬可夫鏈。兩種天氣時新狀態空間有 $2\times2=4$ 個狀態。一般地，k 階記憶可用「最近 k 期的元組」化為一階馬可夫，代價是狀態數指數成長——n-gram 模型隨 n 爆炸的原因（練習 11.10）。

練習 11.4 詳解　(a) 展開 $\boldsymbol{\pi P}=\boldsymbol{\pi}$ 的第一個分量：$\pi_1(1-p)+\pi_2 q=\pi_1$，即 $p\,\pi_1=q\,\pi_2$（第二個分量給出同一條方程）。配合 $\pi_1+\pi_2=1$：由 $\pi_1=\frac{q}{p}\pi_2$ 代入得 $\pi_2\big(\frac{q}{p}+1\big)=1$，故 $\pi_2=\frac{p}{p+q}$、$\pi_1=\frac{q}{p+q}$，即 $\boldsymbol{\pi}=\big[\frac{q}{p+q},\ \frac{p}{p+q}\big]$。直觀：$p,q$ 是離開狀態 1、2 的速率，越難離開的狀態累積越多機率，$\pi_1:\pi_2=q:p$。
(b) 天氣鏈 $p=0.3$、$q=0.5$：$\boldsymbol{\pi}=\big[\frac{0.5}{0.8},\frac{0.3}{0.8}\big]=\big[\frac58,\frac38\big]=[0.625,0.375]$。✓
(c) 跡為 $2-p-q$，行列式為 $(1-p)(1-q)-pq=1-p-q$；取 $\lambda_1=1$、$\lambda_2=1-p-q$ 恰好「和為跡、積為行列式」。把 $\boldsymbol{\pi}_t-\boldsymbol{\pi}$ 沿特徵方向分解：偏差全落在 λ_2 方向、每步乘一次 λ_2，故 $\|\boldsymbol{\pi}_t-\boldsymbol{\pi}\|\propto|1-p-q|^t$。天氣鏈 $\lambda_2=0.2$，與收斂表「差距每步縮小為 0.2 倍」一致。
(d) $p=q=1$ 時 $\lambda_2=-1$：$\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$ 是週期 2 的強制互換鏈。穩態 $[\frac12,\frac12]$ 仍存在，但偏差方向每步乘 -1、永不衰減——分布振盪不收斂（詳見練習 11.6）。

練習 11.5 詳解　(a) 狀態順序 $(\mathrm{G},\mathrm{W},\mathrm{F})$：

$$\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}0.9 & 0.1 & 0\\ 0 & 0.7 & 0.3\\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix}.$$

(b) 寫出 $\boldsymbol{\pi P}=\boldsymbol{\pi}$ 的三個分量（「流入 = 存量」）：

$$\begin{aligned}\pi_G &= 0.9\,\pi_G+\pi_F && \Longrightarrow\ \pi_F=0.1\,\pi_G,\\ \pi_W &= 0.1\,\pi_G+0.7\,\pi_W && \Longrightarrow\ 0.3\,\pi_W=0.1\,\pi_G\ \Longrightarrow\ \pi_W=\tfrac{1}{3}\,\pi_G,\\ \pi_F &= 0.3\,\pi_W && \Longrightarrow\ 0.3\times\tfrac{1}{3}\,\pi_G=0.1\,\pi_G.\ \checkmark\ \text{(自動滿足)}\end{aligned}$$

正規化：$\pi_G\big(1+\frac{1}{3}+\frac{1}{10}\big)=\frac{43}{30}\pi_G=1$，故 $\boldsymbol{\pi}=\big[\frac{30}{43},\frac{10}{43},\frac{3}{43}\big]$。驗算 $\boldsymbol{\pi P}$：第一分量 $0.9\times\frac{30}{43}+\frac{3}{43}=\frac{30}{43}$、第二分量 $0.1\times\frac{30}{43}+0.7\times\frac{10}{43}=\frac{10}{43}$、第三分量 $0.3\times\frac{10}{43}=\frac{3}{43}$，全數吻合。✓
(c) 長期故障比例 $=\pi_F=\frac{3}{43}\approx 0.0698$，即約 7.0% 的日子在維修。（數值：$\boldsymbol{\pi}\approx[0.6977,0.2326,0.0698]$。）

練習 11.6 詳解　(a) $\boldsymbol{P}_1$：不可約——$1\to 2$ 與 $2\to 1$ 都一步可達。週期性——從狀態 1 只能在偶數步返回，$d(1)=\gcd\{2,4,\dots\}=2$：**週期 2**，**非週期條件不成立**。穩態：$\pi_1=\pi_2$ 配合正規化給 $[\frac{1}{2},\frac{1}{2}]$（唯一）。但從 $\boldsymbol{\pi}_0=[1,0]$ 出發：$\boldsymbol{\pi}_1=[0,1]$、$\boldsymbol{\pi}_2=[1,0]$、$\boldsymbol{\pi}_3=[0,1]$……分布永遠振盪、**不收斂**（除非恰從 $[\frac{1}{2},\frac{1}{2}]$ 出發）；不過**時間平均**仍收斂到 $[\frac{1}{2},\frac{1}{2}]$。
(b) $\boldsymbol{P}_2$：狀態 1 是吸收態（$P_{11}=1$），從 1 永遠到不了 2——**不可約條件不成立**。穩態：第二分量給 $0.5\,\pi_2=\pi_2$，故 $\pi_2=0$、$\boldsymbol{\pi}=[1,0]$（唯一）。從 $\boldsymbol{\pi}_0=[0,1]$ 出發，每步兩側質量減半：$\boldsymbol{\pi}_t=[\,1-0.5^t,\ 0.5^t\,]\to[1,0]$，分布**仍然收斂**——質量被吸收態吸光。
(c) (a) 敗在**非週期性**：穩態唯一卻因固定節拍振盪而不收斂。(b) 敗在**不可約性**：此例仍收斂，但那是「被吸收」而非遍歷探索——若鏈中有兩個吸收態，極限就依賴起點。教訓：定理的條件是**充分**條件，缺了它們，結局可能振盪、可能依賴起點，須逐案分析。

練習 11.7 詳解　(a) 對任意狀態 j，利用細緻平衡逐項替換：

$$(\boldsymbol{\pi P})_j=\sum_i \pi_i P_{ij}=\sum_i \pi_j P_{ji}=\pi_j\sum_i P_{ji}=\pi_j,$$

最後一步用了「$\boldsymbol{P}$ 每列和為 1」（$\sum_i P_{ji}=1$ 是對狀態 j 那一列求和）。故 $\boldsymbol{\pi P}=\boldsymbol{\pi}$。■
(b) 穩態驗證：循環鏈中每個狀態恰有一個「上游」（機率 1 流入），故 $(\boldsymbol{\pi P})_1=\pi_3=\frac{1}{3}=\pi_1$，其餘同理，$[\frac{1}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3}]$ 確為穩態。細緻平衡檢查狀態對 $(1,2)$：$\pi_1P_{12}=\frac{1}{3}\times 1=\frac{1}{3}$，但 $\pi_2P_{21}=\frac{1}{3}\times 0=0$，不相等——細緻平衡不成立。（此鏈週期為 3，分布也不收斂，但穩態照樣存在。）
(c) 細緻平衡要求**每一對狀態之間**的雙向流量各自打平（系統可逆）；穩態只要求**每個狀態**的總流入等於總流出，允許「環狀單行道」——(b) 的鏈裡機率沿 $1\to2\to3\to1$ 永恆繞圈，每站進出平衡，但每段路都是單向的。逐對平衡強於逐站平衡：前者蘊涵後者，反之不然。

練習 11.8 詳解　(a) 各頁的對外連結數：$L(\mathrm{A})=L(\mathrm{B})=L(\mathrm{C})=1$。入鏈：A 收到 B 與 C 的連結、B 收到 A 的連結、C 沒有入鏈。以 $d=0.85$、$(1-d)/3=0.05$：

$$\begin{aligned}\mathrm{PR}(\mathrm{A}) &= 0.05 + 0.85\,\big[\mathrm{PR}(\mathrm{B}) + \mathrm{PR}(\mathrm{C})\big],\\ \mathrm{PR}(\mathrm{B}) &= 0.05 + 0.85\,\mathrm{PR}(\mathrm{A}),\\ \mathrm{PR}(\mathrm{C}) &= 0.05.\end{aligned}$$

(b) 把 $\mathrm{PR}(\mathrm{C})=0.05$ 與第二式代入第一式：

$$\mathrm{PR}(\mathrm{A}) = 0.05 + 0.85\big[0.05 + 0.85\,\mathrm{PR}(\mathrm{A}) + 0.05\big] = 0.135 + 0.7225\,\mathrm{PR}(\mathrm{A}),$$

解得 $\mathrm{PR}(\mathrm{A}) = 0.135/0.2775 = \frac{18}{37} \approx 0.4865$，於是 $\mathrm{PR}(\mathrm{B}) = 0.05 + 0.85\times 0.4865 \approx 0.4635$。總和驗算：$0.4865 + 0.4635 + 0.0500 = 1.0000$。✓
(c) C 沒有入鏈，加總項為空，只剩隨機傳送的保底分數 $(1-d)/3$。若 $d=1$：C 變成分數 0 的暫態，且 A $\leftrightarrow$ B 子鏈是週期 2 的強制互換，冪迭代永遠振盪、不收斂。阻尼 $d<1$ 讓每頁到每頁都有正機率，一舉保證**不可約**與**非週期**——Google 採用 $d=0.85$ 的數學理由。

練習 11.9 詳解　(a) Gibbs 抽樣步驟：

1. 初始化 $(x^{(0)}, y^{(0)})$，例如 $(0,0)$；
2. 第 t 輪：先抽 $x^{(t+1)} \sim \mathcal{N}\big(0.8\,y^{(t)},\ 0.36\big)$（用**舊的** y），再抽 $y^{(t+1)} \sim \mathcal{N}\big(0.8\,x^{(t+1)},\ 0.36\big)$（用**剛更新的** x）——每次更新都用其他座標的最新值；
3. 重複 T 輪，丟掉前段 burn-in，其餘 $(x^{(t)}, y^{(t)})$ 即為聯合分布的（相關）樣本。

(b) 把「從完整條件分布抽新值」當提議代入 Hastings 接受率，所有因子恰好相消、$\alpha=1$：沒有提議被浪費，也不需調步長。前提是**每個完整條件分布都能精確抽樣**——共軛貝氏模型常見；抽不動時退回 MH 或混用。
(c) 條件變異數 $1-\rho^2 \to 0$：給定 y，x 幾乎被釘死在 ρy，反之亦然。鏈只能沿 $x \approx y$ 的狹長山脊以極小步伐鋸齒前進，自相關暴增、混合極慢——理論上仍收斂，實務上要極長的鏈；高相關時應改用 HMC 或重新參數化。

練習 11.10 詳解　(a) 語料的相鄰詞對：(我, 愛)、(愛, 機率)、(機率, 我)、(我, 愛)、(愛, 統計)。逐詞統計：「我」作為前詞 2 次、後接「愛」2 次，$\mathbb{P}(\text{愛} \mid \text{我}) = 1$；「愛」作為前詞 2 次、後接「機率」「統計」各 1 次，$\mathbb{P}(\text{機率} \mid \text{愛}) = \mathbb{P}(\text{統計} \mid \text{愛}) = \frac{1}{2}$；「機率」後接「我」1 次，$\mathbb{P}(\text{我} \mid \text{機率}) = 1$。(「統計」位於句尾，沒有後繼觀測。)
(b) 沿鏈相乘：$\mathbb{P}(\text{我} \to \text{愛} \to \text{統計}) = \mathbb{P}(\text{愛} \mid \text{我}) \times \mathbb{P}(\text{統計} \mid \text{愛}) = 1 \times \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$。
(c) bigram 假設「下一個詞只依賴目前這個詞」——詞彙表上的馬可夫性質，語料計數給出轉移機率的最大概似估計。trigram 用練習 11.3(c) 的擴充狀態技巧——以「相鄰詞對」為狀態——化為一階馬可夫鏈，代價是狀態數從 $|V|$ 變成 $|V|^2$。上下文窗長 k 的語言模型同理是 $|V|^k$ 個狀態上的馬可夫鏈。

練習 11.11 詳解　(a) 事件指示變數的變異數為 $p(1-p)$，故 $\mathrm{SE}(\hat{p}) = \sqrt{p(1-p)/N} = \sqrt{0.2 \times 0.8/1000} \approx 0.0126$，估計值約在 0.2 ± 0.025（兩個標準誤）之間。
(b) 標準誤 $\propto 1/\sqrt{N}$：縮小 10 倍需要 N 放大 $10^2 = 100$ 倍，即 $N = 100{,}000$。
(c) 比較收斂階：$\frac{1}{2} > \frac{2}{d} \Leftrightarrow d > 4$。維度超過 4，蒙地卡羅的收斂階就勝過梯形法，且優勢隨 d 擴大——格點法受維度詛咒，蒙地卡羅免疫。貝氏後驗動輒數十、數百維，抽樣是唯一活路——MCMC 成為貝氏計算基石的根本原因。

練習 11.12 詳解　(a) 的模擬即第 11.7 節程式的第 3 段，輸出約 $[0.6249,\ 0.3751]$，與理論穩態 $[0.625, 0.375]$ 一致（誤差量級 $1/\sqrt{200000} \approx 0.002$）——遍歷定理的實地驗證。(b)(c) 參考程式與輸出：

```python
import numpy as np
rng = np.random.default_rng(1)

def mh(step, n=100_000, x0=3.0):
    x, acc = x0, 0
    out = np.empty(n)
    for t in range(n):
        x_new = x + step * rng.normal()
        if np.log(rng.random()) < 0.5 * (x**2 - x_new**2):
            x, acc = x_new, acc + 1
        out[t] = x
    return out[2_000:], acc / n

for step in [0.05, 1.0, 50.0]:
    s, rate = mh(step)
    print(step, round(rate, 2), round(s.mean(), 2), round(s.std(), 2))
```

(b) 步長 1.0 時接受率約 0.70，保留樣本的平均 ≈ 0.00、標準差 ≈ 1.00：從未正規化的 $e^{-x^2/2}$ 成功重建了標準常態。
(c) **步長 0.05（太小）**：接受率約 0.98，看似極佳實則每步只挪一點點，自相關極強、探索極慢，均值與標準差仍可能明顯偏離目標（有效樣本極少、暖身殘留更久）。**步長 50（太大）**：提議幾乎都落在密度近零的遠處，接受率崩到約 0.02，鏈長時間卡在原地。接受率本身不是目標，「單位計算量走過的有效距離」才是；一維隨機漫步提議的甜蜜區間約為接受率 0.4 至 0.7。

公理給了語言，分布給了模型，極限定理給了保證，而馬可夫鏈與蒙地卡羅把這一切變成會動的演算法——下次看到擴散模型生成圖片，你知道那是一條馬可夫鏈正在眼前奔跑。