

# 马尔可夫链

## 参考答案

1. (6 分) 考虑一个有限状态空间  $\Omega$  上不可约的 (irreducible) 马尔可夫核  $P$ . 我们知道  $P$  存在唯一的稳态分布 (stationary distribution)  $\pi$ . 证明对于任意初始分布  $\mu$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \mu P^j = \pi.$$

解 定义另一个马尔可夫核  $\hat{P} = \frac{1}{2}(P + I)$ . 可以把  $\hat{P}$  理解为, 以  $1/2$  概率按  $P$  转移, 以  $1/2$  概率保持在当前状态.  $\pi \hat{P} = \frac{1}{2}(\pi P + \pi) = \pi$ , 因此  $\pi$  也是  $\hat{P}$  的稳态分布.

对任意状态  $x \in \Omega$ , 都有  $\hat{P}(x|x) \geq 1/2 > 0$ , 这样的马尔可夫链被称作 lazy. 一个 lazy 的马尔可夫链一定也无周期. 不可约且无周期的马尔可夫链一定收敛. 因此对任意初始分布  $\mu$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mu \hat{P}^n = \pi,$$

进而有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2n} \sum_{j=0}^{2n-1} \mu \hat{P}^j = \pi.$$

为了证明题设, 我们只需证明

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{2n} \sum_{j=0}^{2n-1} \mu \hat{P}^j - \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} \mu P^j \right) = 0. \quad (*)$$

(这两者的相似有直观的解释: 一边是  $\hat{P}$  对应的马尔可夫链在前  $2n$  时刻的平均分布, 一边是  $P$  对应的马尔可夫链在前  $n$  时刻的平均分布. 而懒惰的  $\hat{P}$  大致就是时间放慢两倍的  $P$ .)

$$\frac{1}{2n} \sum_{j=0}^{2n-1} \mu \hat{P}^j = \frac{1}{2n} \sum_{j=0}^{2n-1} \mu \left( \frac{1}{2}P + \frac{1}{2}I \right)^j = \frac{1}{2n} \sum_{i=0}^{2n-1} \mu P^i \sum_{j=i}^{2n-1} \binom{j}{i} \frac{1}{2^j} = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{2n-1} \mu P^i c_i$$

其中  $c_i = \sum_{j=i}^{2n-1} \binom{j}{i} \frac{1}{2^{j+1}}$ . 为了证明  $(*)$ , 我们希望对大部分  $i < n$ ,  $c_i \approx 1$ , 对大部分  $i > n$ ,  $c_i \approx 0$ .

我们注意到  $c_i$  有其它含义. 考虑一列独立的随机变量  $Z_1, Z_2, \dots \sim \text{Bern}(1/2)$ . 注意到

$$\begin{aligned} \binom{j}{i} \frac{1}{2^{j+1}} &= \Pr \left[ \sum_{k \leq j} Z_k = i \wedge Z_{j+1} = 1 \right] = \Pr \left[ j \text{ 是满足 } \sum_{k \leq j+1} Z_k > i \text{ 的最小整数} \right] \\ c_i &= \sum_{j=i}^{2n-1} \binom{j}{i} \frac{1}{2^{j+1}} = \Pr \left[ \text{满足 } \sum_{k \leq j+1} Z_k > i \text{ 的最小整数} < 2n \right] = \Pr \left[ \sum_{j=1}^{2n-1} Z_j > i \right] \end{aligned}$$

(这个关系并不是巧合.  $Z_i$  其实就表示了  $\hat{P}$  在第  $i$  时刻是否懒惰. 具体来说, 不妨令  $X_0, X_1, X_2, \dots$  表示  $P$  的马尔可夫链, 不难验证  $\hat{X}_i = X_{\sum_{j \leq i} Z_j}$  是  $\hat{P}$  对应的马尔可夫链.)

我们可以用 Chernoff bound 估计  $c_i$ . 令  $\varepsilon = n^{-1/3}$ , 那么由 Chernoff bound

$$\begin{aligned} c_i &\geq 1 - O(n^{-1/3}) = 1 - o(1) && \text{if } i \leq n(1 - \varepsilon) \\ c_i &\leq O(n^{-1/3}) = o(1) && \text{if } i \geq n(1 + \varepsilon) \end{aligned}$$

据此可以证明 (\*)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2n} \sum_{j=0}^{2n-1} \mu \hat{P}^n &= \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{2n-1} \mu P^i c_i \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-\varepsilon n} \mu P^i c_i + \frac{1}{n} \sum_{i=n-\varepsilon n+1}^{n+\varepsilon n-1} \mu P^i c_i + \frac{1}{n} \sum_{i=n+\varepsilon n}^{2n-1} \mu P^i c_i \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-\varepsilon n} \mu P^i (1 - O(n^{-1/3})) + O(n^{-1/3}) + \frac{1}{n} \sum_{i=n+\varepsilon n}^{2n-1} \mu P^i \cdot O(n^{-1/3}) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-\varepsilon n} \mu P^i + O(n^{-1/3}) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \mu P^i + O(n^{-1/3}) \end{aligned}$$

另一种解法: 参考下一题中的分解. 我们按  $j \bmod T$  把求和分成  $T$  类, 证明每一类都收敛, 从而整个求和收敛 (只要收敛就一定收敛到  $\pi$ ). 每一类中的 Markov 核相当于 pass 到了  $P^T$ , 它在每个  $\Omega_j$  中都是不可约且无周期的 Markov 链, 从而收敛.

2. (4 分) 考虑大小为  $n$  的有限状态空间  $\Omega$  上的一个不可约 (irreducible) 马尔可夫核  $P$ , 令  $\pi$  是稳态分布.
  - (1) 证明  $P$  只有一个特征值等于 1.
  - (2) 假设  $P$  有周期  $T > 1$ . 这里  $T = \gcd\{t : \exists x, P^t(x|x) > 0\}$ . 不难证明, 周期性说明状态空间可以划分为  $T$  个非空子集  $\Omega_0, \Omega_1, \dots, \Omega_{T-1}$  满足

$$\forall x, y \in \Omega, \forall j \in \mathbb{Z}_T, P(y|x) > 0 \wedge x \in \Omega_j \implies y \in \Omega_{j+1}.$$

证明 1 的所有  $T$  次根  $e^{2\pi i \frac{k}{T}}$  (for  $k \in \mathbb{Z}_T$ ) 都是  $P$  的特征值.

解

- (1) 课上已经证明  $\dim(P - I) = n - 1$ , 所以特征值为 1 的特征向量只有一维. 我们知道稳态分布  $\mu$  就是这个特征向量.

如果要说明只有一个特征值是 1, 也就是要说明 1 的代数重数等于 1. 反证, 假设 1 的代数重数大于 1. 那么  $P$  的 Jordan 标准型一定包括一个形如

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & & \\ & 1 & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

的子块. 因此, Jordan 分解中的基中有一个非零向量  $\nu$  满足

$$\begin{bmatrix} -\nu- \\ -\mu- \end{bmatrix} P = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\nu- \\ -\mu- \end{bmatrix}$$

只要选一个足够小的  $\varepsilon$ , 就可以使得  $\mu + \varepsilon\nu$  每位非负, 于是可以正则化为一个概率分布  $\frac{\mu + \varepsilon\nu}{\|\mu + \varepsilon\nu\|_1}$ . 于是

$$\frac{\mu + \varepsilon\nu}{\|\mu + \varepsilon\nu\|_1} P^t = \frac{(1 + t\varepsilon)\mu + \varepsilon\nu}{\|\mu + \varepsilon\nu\|_1}$$

也应该是一个分布. 但当  $t$  充分大时, 它不是分布.

(2) 对任意  $k \in \mathbb{Z}_T$ , 构造  $\pi_k$  为

$$\pi_k(x) = e^{-2\pi i \cdot jk/T} \cdot \pi(x) \text{ if } x \in \Omega_j.$$

那么对任意  $j \in \mathbb{Z}_T$  和  $y \in \Omega_j$

$$\begin{aligned} (\pi_k P)(y) &= \sum_{x \in \Omega_{j-1}} \pi_k(x) P(y|x) = e^{-2\pi i \cdot (j-1)k/T} \cdot \sum_{x \in \Omega_{j-1}} \pi(x) P(y|x) \\ &= e^{-2\pi i \cdot (j-1)k/T} \cdot \pi(y) = e^{2\pi i \cdot k/T} \cdot \pi_k(y). \end{aligned}$$

所以  $e^{2\pi i \cdot k/T}$  是一个特征值.

另一种解法: 对  $k \in \mathbb{Z}_T$ , 我们构造 (列) 特征向量  $v$ , 对  $j \in \mathbb{Z}_T, x \in \Omega_j, v_x$  恒为  $e^{2\pi i \cdot jk/T}$ . 即

$$v = \sum_j e^{2\pi i \cdot jk/T} \mathbb{1}_{\Omega_j}$$

由于  $\sum_{y \in \Omega_{j+1}} P(y|x) = 1, \forall x \in \Omega_j$ , 我们有  $P\mathbb{1}_{\Omega_{j+1}} = \mathbb{1}_{\Omega_j}$ , 从而  $Pv = \sum_j e^{2\pi i \cdot jk/T} P\mathbb{1}_{\Omega_j} = \sum_j e^{2\pi i \cdot jk/T} \mathbb{1}_{\Omega_{j-1}} = \sum_j e^{2\pi i \cdot (j+1)k/T} \mathbb{1}_{\Omega_j} = e^{2\pi i \cdot k/T} v$ , 从而  $v$  是一个特征值为  $e^{2\pi i \cdot k/T}$  的特征向量.

3. (6 分) 考虑  $\mathbb{Z}$  上的随机游走. 马尔可夫核是

$$P(x+1|x) = p, \quad P(x-1|x) = 1-p$$

其中  $p \in (0, 1)$  是参数. 请计算这个马尔可夫链返回初始点的概率.

$$\Pr[\exists i > 0 \text{ such that } X_i = X_0].$$

解 不失一般性, 可以假定  $X_0 = 0$ , 然后考虑返回 0 点的概率

$$\Pr_0[\exists i > 0 \text{ such that } X_i = 0].$$

定义  $v(j)$  为如果马尔可夫链从状态  $j$  出发, 经过 0 点的概率

$$v(j) := \Pr_j[\exists i \geq 0 \text{ such that } X_i = 0].$$

这里在  $\Pr$  的下标规定  $X_0$  的 (退化) 分布.

我们关心  $v$  的值. 显然  $v(0) = 1$ . 对  $j \neq 0$ ,

$$\begin{aligned} v(j) &= \Pr_j[\exists i \geq 0, X_i = 0] = p \Pr_j[\exists i \geq 0, X_i = 0 | X_1 = j+1] \\ &\quad + (1-p) \Pr_j[\exists i \geq 0, X_i = 0 | X_1 = j-1] = p v(j+1) + (1-p)v(j-1). \end{aligned}$$

对于  $j \geq 0$ , 数列  $v(0), v(1), v(2), \dots$  有简单的线性递推公式, 它们一定满足

$$v(j) = \begin{cases} \alpha j + \beta, & \text{if } p = \frac{1}{2} \\ \alpha(\frac{1-p}{p})^j + \beta, & \text{if } p \neq \frac{1}{2} \end{cases} \text{ 其中 } \frac{1-p}{p} \text{ 是特征方程 } 1 = px + (1-p)/x \text{ 除了 } 1 \text{ 之外的另一个根}$$

其中  $\alpha, \beta$  是待定常数. 这时分三种情况考虑,

- 如果  $p = \frac{1}{2}$ : 因为  $v(0) = 1$  且  $\forall j, v(j) \in [0, 1]$ , 只能是  $v(j) = 1$ .
- 如果  $p < \frac{1}{2}$ : 这时  $\frac{1-p}{p} > 1$ . 因为  $v(0) = 1$  且  $\forall j, v(j) \in [0, 1]$ , 只能是  $v(j) = 1$ .
- 如果  $p > \frac{1}{2}$ : 这时  $\frac{1-p}{p} < 1$ . 根据  $v(0) = 1$  且  $\forall j, v(j) \in [0, 1]$  只能推出  $v(j) = \alpha(\frac{1-p}{p})^j + (1-\alpha)$  其中  $\alpha \in [0, 1]$ . 因此我们要额外证明  $\lim_{j \rightarrow +\infty} v(j) = 0$ , 这样可以说明  $v(j) = (\frac{1-p}{p})^j$ .

$$\begin{aligned} v(j) &= \Pr_j[\exists n \geq 0, X_n = 0] \leq \sum_{n \geq 0} \Pr_j[X_n = 0] \leq \sum_{n \geq j} \Pr_j[X_n \leq j] \\ &\leq \sum_{n \geq j} \exp\left(-n \cdot D\left(\frac{1}{2} \parallel p\right)\right) = e^{-\Theta(j)}. \end{aligned}$$

其中一步使用了 Chernoff bound.

综合三种情况,  $p v(1) = p \min(1, \frac{1-p}{p}) = \min(p, 1-p)$ . 对称地,  $(1-p) v(-1) = \min(p, 1-p)$ . 所以

$$\Pr[\exists i > 0, X_i = X_0] = p v(1) + (1-p)v(-1) = 2 \min(p, 1-p).$$

另一种解法: 由第 4 题中的引理 1, 我们只需要计算  $\mathbb{E}[N] = \sum_{n \geq 1} \Pr[X_{2n} = X_0]$  ( $N$  和  $E$  的定义也请参照那里).  $\Pr[X_{2n} = X_0] = \binom{2n}{n} (p(1-p))^n$ . 由生成函数  $\sum_{n \geq 0} \binom{2n}{n} x^n = \frac{1}{\sqrt{1-4x}}$  代入  $x = p(1-p)$ , 可以得知  $\mathbb{E}[N] = \frac{1}{\sqrt{1-4p(1-p)}} - 1 = \frac{1}{|1-2p|} - 1$ , 从而  $\Pr[E] = 1 - \frac{1}{1+\mathbb{E}[N]} = 1 - |1-2p|$ .

4. (6 分) 考虑  $\mathbb{Z}^d$  上的随机游走. 马尔可夫核是

$$P(y_1, \dots, y_d | x_1, \dots, x_d) = \begin{cases} 1/3^d, & \text{if } \forall i, |y_i - x_i| \leq 1 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

这个马尔可夫核在各个维度上独立, 便于分析. 证明

$$\Pr[\exists i > 0 \text{ such that } X_i = X_0] = \begin{cases} 1, & \text{if } d = 2 \\ 1 - \Omega(1), & \text{if } d > 2 \end{cases}$$

提示：考虑

$$\mathbb{E}[\text{number of } i > 0 \text{ such that } X_i = X_0].$$

解 定义随机变量  $N$  和事件  $E$  为

$$N := \text{number of } i > 0 \text{ such that } X_i = X_0,$$

$$E := \{\exists i > 0 \text{ such that } X_i = X_0\}.$$

**引理 1.**  $\Pr[E] = 1$  当且仅当  $\mathbb{E}[N] < \infty$ . 当  $\Pr[E] < 1$  时, 有  $\mathbb{E}[N] = \frac{\Pr[E]}{1-\Pr[E]}$ , 或言  $\Pr[E] = \frac{\mathbb{E}[N]}{1+\mathbb{E}[N]}$ .

证明. 由于  $N \geq 0$ ,  $\mathbb{E}[N]$  一定存在 (可能为  $\infty$ ). 如果  $E$  未发生, 那么  $N = 0$ , 因此  $\mathbb{E}[N] = \mathbb{E}[N|E]\Pr[E]$ . 现在 condition on  $E$  发生, 我们记  $i_0$  是最小的  $i > 0$  such that  $X_i = X_0$ , 此时  $N = 1 + (\text{number of } i > i_0 \text{ such that } X_i = X_0)$ . 由 Markov 链的无记忆性,  $\mathbb{E}[\text{number of } i > i_0 \text{ such that } X_i = X_0|E] = \mathbb{E}[N]$ . 由于  $N \geq 0$  以及期望线性性, 我们有  $\mathbb{E}[N] = \Pr[E](1 + \mathbb{E}[N])$ . 如果  $\Pr[E] = 1$ ,  $\mathbb{E}[N]$  只能为  $\infty$ , 否则  $\mathbb{E}[N] = \frac{\Pr[E]}{1-\Pr[E]}$  是有限数.  $\square$

由期望线性性, 我们有  $\mathbb{E}[N] = \sum_{n \geq 1} \Pr[X_n = X_0]$ . 设  $p_n$  表示  $d = 1$  时的随机游走满足  $X_n = X_0$  的概率, 由于每一维独立, 有  $\Pr[X_n = X_0] = p_n^d$ . 在剩下的答案中, 我们要证明  $p_n = \Theta(n^{-1/2})$ . 这说明, 当  $d \leq 2$  时,  $\mathbb{E}[N] = \infty$ ; 当  $d \geq 3$  时,  $\mathbb{E}[N] < \infty$ . 结合引理 1, 便得到题目要求的结论.

估计  $p_n$  有多种办法, 下面我们展示一种完全初等的办法. 不失一般性, 可以假定  $X_0 = 0$ . 注意到给定的马尔可夫核可以直观地理解为如下两步过程: 首先抛一个概率为  $2/3$  的硬币, 根据硬币结果决定是否留在当前状态. 如果不留在当前状态, 那么以 50-50 的概率 +1 或 -1. 具体来说, 定义随机变量  $Z_i = \mathbb{1}[X_i \neq X_{i-1}]$ . 那么  $Z_i \sim \text{Bern}(2/3)$ . condition on  $Z_1 + \dots + Z_n = m$ ,  $X_n$  等于  $m$  个独立随机的  $\pm 1$  的和, 因此  $\Pr[X_n = 0 | Z_1 + \dots + Z_n = m] = \binom{m}{m/2}/2^m$  (如果  $m$  是偶数).

$$\begin{aligned} \Pr[X_n = 0] &= \sum_m \Pr[X_n = 0 | Z_1 + \dots + Z_n = m] \Pr[Z_1 + \dots + Z_n = m] \\ &= \sum_{\text{even } m} \frac{\binom{m}{m/2}}{2^m} \Pr[Z_1 + \dots + Z_n = m] = \sum_{\text{even } m > n/2} \frac{\binom{m}{m/2}}{2^m} \Pr[Z_1 + \dots + Z_n = m] + 2^{-\Omega(n)}. \quad (*) \end{aligned}$$

最后一步利用 Chernoff bound,  $m \leq n/2$  的可能性可以忽略.

**引理 2.** 对  $k \geq 1$ , 我们有

$$\binom{2k}{k} / 2^{2k} = \Theta\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right).$$

证明. 记  $a_k = \binom{2k}{k} 2^{-2k}$ , 展开得  $a_k = (1 - \frac{1}{2k})a_{k-1}$ .

$$\ln a_k = \sum_{i=1}^k \log\left(1 - \frac{1}{2k}\right) \leq -\sum_{i=1}^k \frac{1}{2k} \leq -\frac{1}{2} \log k + \text{常数}.$$

因而  $a_k = O(k^{-1/2})$ . 下界类似, 只需使用  $\ln(1-x) \geq -x - x^2$  对  $x \in [0, 1/2]$  成立.

下界也可以用二阶矩估计. 注意到  $a_k = \text{Binom}(2k, \frac{1}{2})(k)$ . 二项分布  $\text{Binom}(2k, \frac{1}{2})$  的期望是  $k$ , 方差是  $k/2$ . 根据 Chebyshev 不等式, 以至少  $1/2$  的概率落在  $(k - \sqrt{k}, k + \sqrt{k})$  内. 我们又知道二项分布中, 期望的概率最高. 所以  $a_k = \text{Binom}(2k, \frac{1}{2})(k) \geq \frac{1/2}{2\sqrt{k}} = \Omega(k^{-1/2})$ .  $\square$

引理 2 实际在说, 存在常数  $C > c > 0$ , 使得对任意  $k > 1$ ,

$$\binom{2k}{k} / 2^{2k} \in \left[ \frac{c}{\sqrt{k}}, \frac{C}{\sqrt{k}} \right].$$

回到 (\*), 我们可以得到

$$\begin{aligned} \Pr[X_n = 0] &\leq \max_{\text{even } m \in (n/2, n]} \frac{\binom{m}{m/2}}{2^m} + 2^{-\Omega(n)} \leq \frac{C}{\sqrt{n/2}} + 2^{-\Omega(n)} = O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right), \\ \Pr[X_n = 0] &\geq \max_{\text{even } m \in [0, n]} \frac{\binom{m}{m/2}}{2^m} \cdot \Pr[Z_1 + \dots + Z_n \text{ is even}] \geq \frac{c}{\sqrt{n}} \cdot \frac{1}{3} = \Omega\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right). \end{aligned}$$

5. (5 分) 对一个马尔可夫链  $P$ , 用  $\pi$  表示它的一个稳态分布, 用  $\tau(\varepsilon)$  表示它的混合时间.

$$\begin{aligned} \tau(\varepsilon) &= \text{smallest } t \text{ s.t. } d(t) \leq \varepsilon \\ d(t) &= \max_x \Delta_{\text{TV}}(P^t(x, \cdot), \pi) \end{aligned}$$

证明, 对任意  $\varepsilon > 0$ ,  $\tau(2\varepsilon^2) \leq 2\tau(\varepsilon)$ .

解 固定  $\varepsilon$ , 记  $\tau = \tau(\varepsilon)$ .

用 coupling 方法证明题目. 对任意  $x_0$ , 构造  $X_0, X_\tau, X_{2\tau}, Y_0, Y_\tau, Y_{2\tau}$ , 使得  $X_0 = x_0$ ,  $Y_0 \sim \pi$ , 两边的边缘分布都是马尔可夫链 (即  $\Pr[Y_\tau = y_\tau, Y_{2\tau} = y_{2\tau} | Y_0 = y_0] = P^\tau(y_0, y_\tau)P^\tau(y_\tau, y_{2\tau})$ , 对  $X_t$  类似), 并且  $\Pr[X_{2\tau} \neq Y_{2\tau}] \leq 2\varepsilon^2$ .

因为  $\Delta_{\text{TV}}(X_\tau, Y_\tau) = \Delta_{\text{TV}}(P^\tau(x_0, \cdot), \pi) \leq \varepsilon$ , 所以通过 coupling 可以令  $\Pr[X_\tau = Y_\tau] \geq 1 - \varepsilon$ .

如果  $X_\tau = Y_\tau$ , 可以让两个马尔可夫链保持相同,  $\Pr[X_{2\tau} = Y_{2\tau} | X_\tau = Y_\tau] = 1$ .

如果  $X_\tau = x \neq y = Y_\tau$ , 这时  $X_{2\tau}, Y_{2\tau}$  的条件分布分别是  $P^t(x, \cdot), P^t(y, \cdot)$ . 因为

$$\Delta_{\text{TV}}(P^t(x, \cdot), P^t(y, \cdot)) \leq \Delta_{\text{TV}}(P^t(x, \cdot), \pi) + \Delta_{\text{TV}}(P^t(y, \cdot), \pi) \leq 2\varepsilon,$$

可以通过 coupling 令  $\Pr[X_{2\tau} = Y_{2\tau} | X_\tau = x, Y_\tau = y] \geq 1 - 2\varepsilon$ .

于是

$$\Pr[X_{2\tau} \neq Y_{2\tau}] = \Pr[X_{2\tau} \neq Y_{2\tau} | X_\tau \neq Y_\tau] \Pr[X_\tau \neq Y_\tau] \leq 2\varepsilon^2.$$

6. (10 分) 简单图  $G$  中有  $n$  个点, 最大度数记为  $\Delta$ . 用  $C > 5\Delta$  种颜色对  $G$  随机点染色, 要求任意一对相邻点的染色不同. 为了均匀采样一个随机染色, 我们使用 MCMC 方法. 马尔可夫核是:

- 假设当前染色为  $f : V \rightarrow C$ .
- 随机选取一个点  $v \in C$ , 随机选取一个颜色  $c \in C$ .

- 如果  $v$  的邻居的颜色都不是  $c$ , 就将  $v$  的染色修改为  $c$ ; 否则保持染色不变.

请估算混合时间  $\tau(\varepsilon)$ , 给出一个尽量好的上界.

$$\tau(\varepsilon) = \text{smallest } t \text{ s.t. } d(t) \leq \varepsilon$$

$$d(t) = \max_{\mu} \Delta_{\text{TV}}(\mu P^t, \pi)$$

**注.** 如果想用 coupling 分析  $C > 2\Delta$  的情形, 建议用  $S_t \subseteq V$  表示  $t$  时刻 coupling 中两个染色一致的点集. 考虑被  $S_t$  切的边 (一个端点在  $S_t$  中, 另一个端点在  $S_t$  外) 有怎样的影响.

**注.** 马尔可夫链可以优化为“随机选取一个  $v$  的邻居中未出现的颜色  $c \in C$ ”.

**解** 使用 coupling 分析, 定义马尔可夫链  $\{(X_t, Y_t)\}_{t \geq 0}$ . 马尔可夫核是:

- 当前染色为  $X_{t-1}, Y_{t-1}$ .
- 随机选取一个点  $v \in V$ . 在  $v$  以外的部分, 令  $X_t$  与  $X_{t-1}$  相同, 令  $Y_t$  与  $Y_{t-1}$  相同.

用  $\mathcal{X} = \{X_{t-1}(u) \mid \{u, v\} \in E\}$  和  $\mathcal{Y} = \{Y_{t-1}(u) \mid \{u, v\} \in E\}$  分别表示  $v$  的邻居的颜色集合.

- 如果  $X_{t-1}(v) \neq Y_{t-1}(v)$ , 随机选取一个颜色  $c \in C$ . 如果  $c \notin \mathcal{X}$ , 就令  $X_t(v) = c$ ; 否则保持染色不变. 如果  $c \notin \mathcal{Y}$ , 就令  $Y_t(v) = c$ ; 否则保持染色不变.

这样的话,  $X_t(v) = Y_t(v)$  的概率至少是  $\frac{C - |\mathcal{X} \cup \mathcal{Y}|}{C}$ .

- 如果  $X_{t-1}(v) = Y_{t-1}(v)$ . 从一个特定的分布采样  $(c, c')$ . 边缘分布是均匀分布. 如果  $c \notin \mathcal{X}$ , 就令  $X_t(v) = c$ ; 否则保持染色不变. 如果  $c' \notin \mathcal{Y}$ , 就令  $Y_t(v) = c'$ ; 否则保持染色不变.

为了让  $X_t(v) = Y_t(v)$  的概率尽量大, 需要适当地设置  $(c, c')$  的分布. 不难做到,

$$\Pr[c = c' \wedge c \notin \mathcal{X} \cup \mathcal{Y}] = \frac{C - |\mathcal{X} \cup \mathcal{Y}|}{C}, \quad \Pr[c \in \mathcal{X} \wedge c' \in \mathcal{Y}] = \frac{\min(|\mathcal{X}|, |\mathcal{Y}|)}{C}.$$

这样的话,  $X_t(v) = Y_t(v)$  的概率是  $\frac{C - |\mathcal{X} \cup \mathcal{Y}| + \min(|\mathcal{X}|, |\mathcal{Y}|)}{C} = \frac{C - \min(|\mathcal{X} \setminus \mathcal{Y}|, |\mathcal{Y} \setminus \mathcal{X}|)}{C}$ .

根据提示, 定义  $S_t = \{v \mid X_t(v) = Y_t(v)\}$ . 定义  $N_t = |S_t|$ .

考虑  $X_{t-1}, Y_{t-1}$  到  $X_t, Y_t$  的马尔可夫核的采样过程.

- 如果  $X_{t-1}(v) \neq Y_{t-1}(v)$  (即  $v \notin S_{t-1}$ ), 只要采样得到的颜色  $c$  不在  $\mathcal{X} \cup \mathcal{Y}$  中, 那么  $v$  在两边的颜色都会被更新到  $c$ . 用  $E(v, S)$  表示  $v$  和  $S$  之间的边数. 那么

$$|\mathcal{X} \cup \mathcal{Y}| \leq E(v, S_{t-1}) + 2E(v, V \setminus S_{t-1}) \leq 2\Delta - E(v, S_{t-1}).$$

于是  $X_t(v) = Y_t(v)$  的概率至少是  $\frac{C - 2\Delta + E(v, S_{t-1})}{C}$ .

- 如果  $X_{t-1}(v) = Y_{t-1}(v)$  (即  $v \in S_{t-1}$ ),  $X_t(v) \neq Y_t(v)$  的概率至多是

$$\frac{\min(|\mathcal{X} \setminus \mathcal{Y}|, |\mathcal{Y} \setminus \mathcal{X}|)}{C} \leq \frac{E(v, V \setminus S_{t-1})}{C}.$$

观察上面的概率. 当  $v \notin S_{t-1}$  时,  $v$  与  $S_{t-1}$  的连边“有益”; 当  $v \in S_{t-1}$  时,  $v$  与  $V \setminus S_{t-1}$  的连边“有害”. 因为

$$\sum_{v \notin S_{t-1}} E(v, S_{t-1}) = E(V \setminus S_{t-1}, S_{t-1}) = \sum_{v \in S_{t-1}} E(v, V \setminus S_{t-1}),$$

这两种作用恰好可以相互抵消.

具体来说, 给定  $X_{t-1}, Y_{t-1}$  时,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\left[N_t - N_{t-1} \mid X_{t-1}, Y_{t-1}\right] &\geq \sum_{v \notin S_{t-1}} \frac{1}{n} \frac{C - 2\Delta + E(v, S_{t-1})}{C} - \sum_{v \in S_t} \frac{1}{n} \frac{E(v, V \setminus S_{t-1})}{C} \\ &= \sum_{v \notin S_{t-1}} \frac{1}{n} \frac{C - 2\Delta}{C} \\ &= \frac{n - N_{t-1}}{n} \frac{C - 2\Delta}{C}. \end{aligned}$$

对两边同时求期望, 可以得到

$$\mathbb{E}[N_t] - \mathbb{E}[N_{t-1}] = \frac{n - \mathbb{E}[N_{t-1}]}{n} \frac{C - 2\Delta}{C}.$$

于是解得

$$\mathbb{E}[N_t] = n - \left(1 - \frac{C - 2\Delta}{nC}\right)^t (n - \mathbb{E}[N_0]).$$

当  $t \geq \frac{\log(\varepsilon/n)}{\log(1 - \frac{C - 2\Delta}{nC})} \geq \frac{nC}{C - 2\Delta} \log(n/\varepsilon)$  时,  $\mathbb{E}[N_t] \geq n - \varepsilon$ , 根据 Markov bound,

$$\Pr[X_t \neq Y_t] = \Pr[N_t \neq n] = \Pr[N_t \leq n - 1] \leq \varepsilon.$$

上述分析不依赖于  $X_0, Y_0$  的分布. 只要令  $X_0$  是任意染色,  $Y_0$  服从稳态分布 (均匀分布), 就得到

$$\tau(\varepsilon) \leq \frac{nC}{C - 2\Delta} \log(n/\varepsilon).$$