

随机游走中环面和有界网格的预期首次返回时间

NAN AN

摘要. 我们考虑在一个 $n \times n$ 网格上的随机游走, 其中相对的边缘被识别为同一个点, 形成了一个具有 $(n-1)^2$ 个独特状态的二维环面。我们证明了从任意固定的状态 (例如原点) 开始, 首次返回的时间期望值正好是 $(n-1)^2$ 。我们的证明自然地推广到大小为 $n \times m$ 的矩形网格, 在这种情况下, 首次返回的时间期望值变为 $(n-1)(m-1)$ 。更广泛地说, 我们将论证扩展到尺寸为 $n_1 \times n_2 \times \cdots \times n_d$ 的 d 维环形网格中, 在这种情况下, 首次返回时间的期望值是 $n_1 n_2 \cdots n_d$ 。我们还讨论了在不同边界条件下该问题的情况。

1. 问题表述

我们遵循如 [1][2] 中给出的马尔可夫链的标准定义和符号。

我们研究在由一个 $n \times n$ 网格识别对边形成的离散二维环面上的随机游走。每个状态代表环面上的一个点, 并且在每一步, 行走者以均匀随机的方式移动到四个相邻状态之一, 在边界处循环。

我们将网格上的随机游走建模为具有转移矩阵的马尔可夫链。状态空间是

$$\Omega = \mathbb{Z}_{n-1} \times \mathbb{Z}_{n-1},$$

由 $(n-1)^2$ 个状态组成。

定义 $U_{(i,j),(a,b)}$ 为从状态 (i,j) 转移到状态 (a,b) 的转移概率, 由

$$U_{(i,j),(a,b)} = \begin{cases} 1/4, & i \equiv a \pm 1 \pmod{n-1}, j = b, \\ 1/4, & i = a, j \equiv b \pm 1 \pmod{n-1} \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

给出。换句话说, 从任意状态 (i,j) 开始, 行者以均匀随机的方式移动到其四个相邻点中的一个, 并且在网格的边缘处会环绕。

给定一个在 Ω 上的概率分布 s , 其演化由

$$s'_\omega = \sum_{w' \in \Omega} s_{w'} U_{w', \omega}.$$

Date: 2025 年 5 月 3 日.

Email: ann5@mcmaster.ca.

我们引入一个展平映射 $f: \Omega \rightarrow \mathbb{N}$ 由

$$f(i, j) = i(n-1) + j,$$

使得我们可以将 s 表示为向量, 将 U 表示为矩阵:

$$s \in \mathbb{R}^{(n-1)^2}, \quad (s)_{f(w)} = s_w,$$

$$U \in \mathbb{R}^{(n-1)^2 \times (n-1)^2}, \quad (U)_{f(w), f(w')} = U_{w, w'}.$$

因此, 在经过 k 步骤后分布就是

$$s^k = s^0 U^k.$$

备注 1.1. 平坦映射 f 的选择在此处无关紧要。

我们现在形式化感兴趣的量。

定义 1.2. 对于 $k \in \mathbb{N}^+$, 令 p_k 表示随机游走首次在第 k 步返回原点的概率。预期首次返回时间 E 被定义为

$$E = \sum_{k=1}^{\infty} k p_k.$$

我们的结果是:

定理 1.3. 对于在 Ω 上的随机游走, 其转移概率为 U , 首次返回时间的期望值是 $E = (n-1)^2$ 。

2. 候诊室建设

直接在 Ω 上使用马尔可夫链是不方便的, 因为路径可以自由通过原点。为了准确捕捉首次返回, 我们对链进行如下修改:

- (1) 步骤 1. 从网格中移除原点 $o = (o_x, o_y)$ 。
- (2) 步骤 2. 引入两个新状态:
 - (a) A 候诊室状态 l , 可以从 o 的四个邻居 A 以概率 $1/4$ 达到。
 - (b) 一个吸收态 b , 其以概率 1 过渡到 l 。

因此, 新的状态空间是

$$\Omega^* = (\Omega \setminus \{o\}) \cup \{l, b\}.$$

我们定义新的转移矩阵 M 在 Ω^* 上由

$$M_{w,w'} = \begin{cases} U_{w,w'}, & \text{if } w, w' \notin \{l, b\}, \\ 1/4, & \text{if } w \in A, w' = l, \\ 1, & \text{if } w = l, w' = b, \\ 1, & \text{if } w = b, w' = b, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

为了保持矩阵结构的一致性, 我们定义了一个修改后的展平映射 f^* 。

$$f^*(w) = \begin{cases} f(w), & \text{if } w \in \Omega \setminus \{o\}, f(w) < f(o), \\ f(w) - 1, & \text{if } w \in \Omega \setminus \{o\}, f(w) > f(o), \\ (n-1)^2 - 1, & \text{if } w = l, \\ (n-1)^2, & \text{if } w = b. \end{cases}$$

在这种索引下, 矩阵 M 取块形式

$$M = \begin{bmatrix} Q & R \\ 0 & T \end{bmatrix}$$

其中

$$Q \in \mathbb{R}^{(n-1)^2-1 \times (n-1)^2-1}, \quad R \in \mathbb{R}^{(n-1)^2-1 \times 2}, \quad T \in \mathbb{R}^{2 \times 2}.$$

我们观察到以下命题:

命题 2.1. 矩阵 Q , R 和 T 满足:

- (1) 对于 $w \in A$, Q 的行和为 $3/4$; 否则, 它们为 1。
- (2) 非零项位于 R 的第一列中, 其中 $R_{a,0} = 1/4$ 对于 $a \in A$ 成立。
- (3) 矩阵 T 是

$$T = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

和 $T^2 = T$ 。

- (4) Q 是对称的: $Q = Q^T$ 。

命题 2.2. 对于每个 $k \geq 1$, 矩阵幂 M^k 满足

$$M^k = \begin{bmatrix} Q^k & \sum_{j=0}^{k-1} Q^j R T^{k-1-j} \\ 0 & T \end{bmatrix}.$$

由于我们已经移除了原点，我们的初始状态分布 s^0 在 Ω^* 上应该是将均匀概率分配给原点的四个邻域的状态分布：

$$s_w^0 = \begin{cases} 1/4, & \text{if } w \in A, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

引理 2.3. 令 $u \in \mathbb{R}^{(n-1)^2-1}$ 为全一的行向量，则

$$s^0 = u(I - Q)^T.$$

证明. 注意左乘 u 等价于取 $(I - Q)$ 的行和。然后它直接由 2.1(1) 得出。 $\square$

备注 2.4. 注意这个引理可以高度推广。

由于已经发生了一步，预期返回时间变为

$$\begin{aligned} E &= 1 + \sum_{k=1}^{\infty} k s_l^k \\ &= 1 + \sum_{k=1}^{\infty} k (s^0 M^k)_l \\ &= 1 + \sum_{k=1}^{\infty} k \sum_{a \in A} s_a^0 (M^k)_{a,l}. \end{aligned}$$

由 M^k 的块形式，并注意到 T 消除了对第一列的贡献，我们有

$$(M^k)_{a,l} = (Q^{k-1} R)_{a,0}.$$

因此，

$$\begin{aligned} E &= 1 + \sum_{k=1}^{\infty} k \sum_{a \in A} s_a^0 (Q^{k-1} R)_{a,0} \\ &= 1 + \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{\infty} k \sum_{a \in A} \sum_{a' \in A} Q_{a,a'}^{k-1} \frac{1}{4} \\ &= 1 + \frac{1}{16} \sum_{k=1}^{\infty} k \sum_{a,a' \in A} Q_{a,a'}^{k-1}. \end{aligned}$$

还请注意，

$$\frac{1}{16} \sum_{a,a' \in A} Q_{a,a'}^k = s^0 Q^k (s^0)^T.$$

因此，我们得出结论：

命题 2.5. 期望首次返回时间 E 满足

$$E = 1 + s^0 \left(\sum_{k=1}^{\infty} k Q^{k-1} \right) (s^0)^T.$$

3. 计算矩阵幂级数

为了计算这个级数，我们首先需要证明它收敛。为此，我们使用了谱范数的概念，它是这样定义的

$$\|A\|_2 = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}.$$

命题 3.1. 令 (A_n) 为矩阵序列。如果 $\|A_n\|_2$ 收敛，则级数 A_n 按元素收敛。

证明. 对于每个标准基向量 e_j ，我们有

$$|(A_n)_{ij}| = |(A_n e_j)_i| \leq \|A_n e_j\|_2 \leq \|A_n\|_2.$$

因此，该序列的收敛性立即由柯西准则得出。 $\square$

命题 3.2. 矩阵 Q 满足 $\|Q\|_2 < 1$ 。

证明. 注意，将一个向量 x 乘以 Q 等于对每个顶点的邻居中的 x 的值进行平均，权重相等为 $1/4$ 。形式上，假设 x 是单位向量，即 $|x|_2 = 1$ 。由于平均是一种严格收缩的操作，除非 x 在每个邻域上都是常数（全局来说这是不可能的，除非 x 处处为常数，并且常向量不会因为边界顶点的度数 3 而被 Q 完全保留），我们得出结论

$$|Qx|_2 < |x|_2 = 1$$

对于所有 $x \neq 0$ 都成立。因此， $\|Q\|_2 = \sup_{|x|_2=1} |Qx|_2 < 1$ 。 $\square$

命题 3.3. 令 Q 为一个矩阵，使得 $\|Q\|_2 < 1$ 。那么，以下级数逐项收敛：

$$S_1 = \sum_{k=0}^{\infty} Q^k, \quad S_2 = \sum_{k=1}^{\infty} k Q^{k-1}.$$

此外，

$$S_1 = (I - Q)^{-1}, \quad S_2 = (I - Q)^{-2}.$$

证明. 收敛性直接来自于 $\sum_{k=0}^{\infty} \|Q^k\|_2$ 和 $\sum_{k=1}^{\infty} k \|Q^{k-1}\|_2$ 的收敛性。验证这一点是直截了当的：

$$S_1 - Q S_1 = I, \quad S_1 = (I - Q)^{-1}.$$

对于 S_2 ，我们观察到：

$$(S_1)^2 = \left(\sum_{i=0}^{\infty} Q^i \right) \left(\sum_{j=0}^{\infty} Q^j \right) = \sum_{k=0}^{\infty} (k+1) Q^k,$$

其中我们将各项根据 $i+j=k$ 进行分组，因此

$$(3.1) \quad S_2 = (I - Q)^{-2}$$

$\square$

备注 3.4. S_1 的存在表明 $I - Q$ 是可逆的。或者，由于 $\|Q\|_2 < 1$ 和 Q 是对称的，其谱半径满足 $\rho(Q) = \max\{|\lambda| \mid \lambda \in \text{spec}(Q)\} < 1$ 。因此， $I - Q$ 的特征值形式为 $1 - \lambda$ ，且有 $|\lambda| < 1$ ，所以它们都是严格正数。特别是， $\det(I - Q) \neq 0$ 。

回到期望的首次返回时间，我们有

$$\begin{aligned} E &= 1 + s^0 \left(\sum_{k=1}^{\infty} k Q^{k-1} \right) (s^0)^T \\ &= 1 + s^0 (I - Q)^{-2} (s^0)^T \\ &= 1 + (s^0 (I - Q)^{-1}) \left(s^0 ((I - Q)^T)^{-1} \right)^T \\ &= 1 + (s^0 (I - Q)^{-1}) u^T \end{aligned}$$

其中 u 是相应维度的所有元素为 1 的行向量。

因此，我们有

命题 3.5. 期望首次返回时间 E 满足

$$E = 1 + (s^0 (I - Q)^{-1}) u^T$$

备注 3.6. 这个命题具有高度的普遍性，因为我们没有使用 $Q = Q^T$ 这一事实。

4. 预期首次返回时间的推导

现在，通过 2.2，2.3 和 3.1，我们可以进一步简化表达式 E ：

$$\begin{aligned} E &= 1 + uu^T \\ &= 1 + |u|_2^2 = (n - 1)^2 \end{aligned}$$

这给出了我们的结果 1.3。这一结果已被我们通过数值方法验证。

我们开发的证明方法提供了对以下内容的洞察：

- 通过引入一个“等待室”和一个吸收态来计算首次返回时间。
- 避免通过利用转换矩阵 Q 的结构来直接计算矩阵逆。
- 通过随机游走的性质和平均行为来建立 $\|Q\|_2 < 1$ 。

很容易看出我们的证明方法可以推广到二维和更高维的矩形网格，因为在任何时候我们都没有依赖于特定于二维正方形网格的属性：展平映射、矩阵 M 和 Q （带 $Q = Q^T$ ）以及起始状态 s^0 都以完全相同的方式交互。唯一的变化是独特状态的数量。因此，

定理 4.1. 对于一个维度为 d 的环面网格 (大小为 $n_1 \times \cdots \times n_d$, 即具有周期性边界条件), 每个点的第一个预期返回时间是 $n_1 n_2 \cdots n_d$ 。

我们也可以研究其他边界条件。

4.1. 保持静止. 在一个二维的 $n \times n$ 网格上, 考虑“静止不动”的边界条件: 如果一个移动会使行者走出网格, 则行者会保持在当前位置。在这种情况下, 转移矩阵 Q 保持对称; 唯一的变化是状态空间现在有 n^2 个状态, 而不是 $(n-1)^2$ 个。

因此, 我们有:

定理 4.2. 对于带有“保持不动”边界条件的 $n \times n$ 网格上的随机游走, 首次返回时间的期望值是 n^2 。

4.2. 反射. 另一个自然的边界条件是“反射”边界: 如果行走者试图移出网格, 它们将反射回网格内 (即, 尝试的移动被取消, 行走者改为向相反方向移动)。

这种情况更棘手, 因为 Q 不再是对称的, 因此 3.5 简化为

$$E = 1 + \sum_i (s^0 (I - Q)^{-1})_i$$

再次假设 $s^0 = u(I - Q)$, 我们直接观察到 u :

$$u_w = \begin{cases} 1/4, & \text{if } w \text{ is on the corner} \\ 1/2, & \text{if } w \text{ is on the edge} \\ 1, & \text{if } w \text{ is inside} \end{cases}$$

将 u 的分量相加得到 $(n-1)^2 - 1$, 因此,

定理 4.3. 对于具有“反射”边界条件的 $n \times n$ 网格上的随机游走, 首次返回时间的期望值是 $(n-1)^2$ 。

5. 进一步工作

借此, 我们也指出了可以探索的一些潜在方向:

- **一般平铺** 将该方法扩展到其他正则密铺, 如六边形或三角形网格, 其中局部邻域结构不同。我们的方法应该可以轻松地推广到这些情况中的一些。

REFERENCES

- [1] David A. Levin, Yuval Peres, and Elizabeth L. Wilmer. *Markov Chains and Mixing Times*. American Mathematical Society, 2009.
- [2] Rick Durrett. *Probability: Theory and Examples*. Cambridge University Press, 2019.