数学特論 B4 のレジュメ

12 月 12 日 (木曜 2 限)

さて，前回に引き続き $P = (P(i,j))$ を推移確率行列，μ を S 上の分布とする．
以下では (P,μ) マルコフ連鎖の分布を $\mathbf{P}_\mu$ と書き，特に $\mu = \delta_j$ のときは単に $\mathbf{P}_j$ と書く．なお, $\mathbf{P}_\mu$ は状態空間 S 上の分布ではないことに注意せよ (厳密に言えば $\mathrm{Map}(\mathbf{N}, S)$ 上の分布である)．例えば

$$\mathbf{P}_\mu\Big((X_k)_{k\in\mathbf{N}}\text{に関する条件}\Big)$$

と書いたらもう自動的に (X_k) は (P,μ) マルコフ連鎖だと思っているわけである．

マルコフ連鎖は「重み (確率) の運び屋」だと自然に思える．時刻 n に単位質量が $i \in S$ にあった場合に，時刻 $n+1$ においてはその重みが S 上の別の点 j にどうばらまかれるかを指定するのが推移確率行列 $P = (P(i,j))$ だというわけだ．

またマルコフ連鎖を定義した際には，「時刻 n まで行ってから時刻 $n+1$ でどうなるか」を指定したわけだが，実はもっと一般に「時刻 n まで行ってから時刻 $n+m$ でどうなるか」も自動的にわかる．（これをチャップマン・コルモゴロフ方程式とよぶことが多い）

定理 1. $n, m \in \mathbf{N}$ と $i, j \in S$, $\mu \in \mathrm{Prob}(S)$ は任意だとする．

- $\mathbf{P}_\mu(X_n = j) = (\mu P^n)_j$．すなわち，$(X_k)_{k\in\mathbf{N}}$ が (P,μ) マルコフ連鎖ならば，X_n が S 上に誘導する分布は μP^n *(横ベクトル！)* である．
- $\mathbf{P}_i(X_n = j) = \mathbf{P}_\mu(X_{n+m} = j \mid X_m = i) = P^n(i,j) \qquad$ *(P の n 乗の (i,j) 成分)*

証明は定義から出発してごく簡単にできる．さらにもっと一般に次が示せる (しかもそんなに難しくない)．
“$\mathbf{P}_\mu(X_m = i) \neq 0$ ならば，時刻 m を時刻の原点にとり直した過程 $(X_{m+k})_{k=0,1,2,\ldots}$ は条件付き確率 $\mathbf{P}_\mu(\bullet \mid X_m = i)$ の下で (P,δ_i) マルコフ連鎖になる”．

定常分布と可逆分布 推移確率行列 $P = (P(i,j))_{i,j\in S}$ が S 上に与えられているとする．

- 以下の条件を満たす時に，S 上の分布 π が**定常分布**であるいう．

$$\pi P = \pi \quad \Longleftrightarrow \quad \sum_{i\in S} \pi(i) P(i,j) = \pi(j) \quad (\forall i \in S).$$

- 以下の条件を満たす時に，S 上の分布 π が**可逆分布**であるいう．

$$\pi(i) P(i,j) = \pi(j) P(j,i) \qquad (\forall i, j \in S).$$

定常分布と可逆分布の基本性質 設定と記号は上のとおりとする．以下の 3 つの性質が比較的簡単に確認できる．

- π が定常分布ならば, 任意の $n = 0, 1, 2, \ldots$ に対して $\pi P^n = \pi$ である．これは $\mathbf{P}_\pi(X_n = i) = \pi(i)$ $(\forall i \in S)$ といっても同値である．
- π が可逆分布であれば定常分布である．（逆は成立しない）
- P が対称行列ならば，$\pi(i) = 1/|S|$ $(\forall i \in S)$ として定めた π （すなわち一様分布）は可逆分布である．
- π が可逆分布だとし，(X_k) が (P,π) マルコフ連鎖だとする．このとき任意の $N \in \mathbf{N}$ に対して時間を反転させた確率過程 $(X_N, X_{N-1}, \ldots, X_1, X_0)$ も (P,π) マルコフ連鎖である (正確には時間反転して分布が不変であることと π が可逆であることは同値)．

簡単な例 1: $S=\{1,2,3\}$ として，推移確率行列 P を以下で与える．

$$P=\begin{bmatrix} 0 & 2/3 & 1/3 \\ 1/3 & 0 & 2/3 \\ 2/3 & 1/3 & 0 \end{bmatrix}.$$

このとき，定常分布は $\pi=(1/3,1/3,1/3)$ のみ，可逆分布は存在しないことが簡単な線形代数の知識 (固有値や固有ベクトルなど) を使えば示せる．

実際，$\pi=(\pi(1),\pi(2),\pi(3))$ が定常であることは，P の固有値 1 に対する横固有ベクトルであること同値である．

$$(\pi(1),\pi(2),\pi(3))\begin{bmatrix} 0 & 2/3 & 1/3 \\ 1/3 & 0 & 2/3 \\ 2/3 & 1/3 & 0 \end{bmatrix}=(\pi(1),\pi(2),\pi(3)).$$

考えづらければ，転置をとって P^t の固有値 1 に対する (縦) 固有ベクトルの話に持ち込めばよい．

$$\begin{bmatrix} 0 & 1/3 & 2/3 \\ 2/3 & 0 & 1/3 \\ 1/3 & 2/3 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\pi(1)\\ \pi(2)\\ \pi(3)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\pi(1)\\ \pi(2)\\ \pi(3)\end{bmatrix}.$$

P^t-E_3 を掃き出し計算すれば求める固有ベクトルがわかる．（もちろん行列をいっさい使わずに，$(\pi(1),\pi(2),\pi(3))$ に対する連立 1 次方程式と思って解いてもよい.）

注意: 可逆分布が存在しないことは「図形的な考察」からも簡単に想像がつく．つまり S を 3 角形として図示すると，この推移確率は片方の向きに回転する確率が，逆向きの確率の 2 倍になっている．したがって，マルコフ連鎖は時間反転について不変であるはずがない．（ただしこの種の直感的考察は定常分布が一様分布であることを暗黙のうちに使っているので，濫用するのは危険かもしれない．例えば次の例で $q>p$ とした場合と比較せよ.）

簡単な例 2: $S=\{1,2,\ldots,M\}$ として，推移確率行列 P を以下で与える．なお $0<p<1$ かつ $q:=1-p$ である．

$$P=\begin{pmatrix} q & p & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ q & 0 & p & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 & p & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \ldots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & q & 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & q & 0 & p \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & q & p \end{pmatrix} \qquad \text{(3 重対角行列)}$$

このとき上と同様の簡単な掃き出し計算で P の固有値 1 に対する横固有ベクトル空間は 1 次元であることがわかる．(かなりの規則性があるので行列のサイズが大きくても難しくない.) よって定常分布は存在するにしても一意的だが，実際に以下のものが存在する．

$$\pi(i)=\begin{cases} (\text{定数})\times\left(\frac{p}{q}\right)^{i-1} & (p\neq q\ \text{の場合}) \\ \frac{1}{M} & (p=q=1/2\ \text{の場合}) \end{cases}$$

ここで (定数) $=(1-p/q)/\{1-(p/q)^M\}$ である (正規化定数)．ごく簡単な直接計算で

$$\pi(i)P(i,i+1)=\pi(i+1)P(i+1,i) \qquad (1\leq i\leq M-1)$$

となることが確認できるので，この π は可逆であることもわかる．