入門確率過程

1.2 節 有限状態 Markov 連鎖

棟近春樹

状態が 2 種類より多い場合の Markov 連鎖について考察する。 各時刻は N 個の状態$1, 2, ..., N$をとるとする

def N 状態の Markov 連鎖

各時刻に取りうる状態の全体$S = \{1, 2, ..., N\}$を状態空間とよぶ

任意の時刻$n = 1, 2, ...$と状態空間の値, $i_0, i_1, ... \in S$に対し、

$$P(X_n = i_n \mid X_0 = i_0, X_1 = i_1, ..., X_{n-1} = i_{n-1})$$
$$= P(X_n = i_n | X_{n-1} = i_{n-1})$$

が成り立つようなの確率過程$\{X_n\}_{\mathrm{n=0,1,2,..}}$

N 状態の Markov 連鎖のように、「過去のことを忘れる」性質を Markov 性という

(ii)

def Markov 連鎖の時刻 n でのの分布

$0 \leq p_i \leq 1$かつ$\sum_{i \in S} p_i = 1$を満たす$\boldsymbol{p} = (p_1, p_2, .., p_N)$ を分布という

$p_i^{(n)} := P(X_n = i)$とおき、$\boldsymbol{p}^{(n)} = \left(p_i^{(n)}\right)_{i \in S}$ を Markov 連鎖の時刻 n での分布という

状態$i, j \in S$に対し、$P(X_n = j | X_{n-1} = i)$は n によらずp_{ij}と仮定。 これは i から j へ推移する確率で推移確率とよぶ。行列

$$P = \left(p_{ij}\right)_{i,j \in S} = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & ...p_{1N} \\ p_{21} & p_{22} & ...p_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ p_{N1} & p_{N2} & ...p_{NN} \end{pmatrix}$$

は推移確率行列とよぶ　　$(0 \leq p_{ij} \leq 1$かつ$\sum_{j \in S} p_{ij} = 1)$

特に、$\sum_{i \in S} p_{ij} = 1$を満たすとき、P は二重確率行列という

Markov 連鎖に関する確率計算

状態空間$S=\{1,2,...,N\}$, 初期分布$v=(v_i)_{i\in S}$,推移確立行列$P=(p_{ij})_{i,j\in S}$のマルコフ連鎖$\{X_n\}$で成り立つ定理を述べる

Th 1.4

任意の時刻 n と各時刻の状態$i_0,...,i_n\in S$に対し
$P(X_0=i_0,X_1=i_1,...,X_{n-1}=i_{n-1})=v_{i_0}p_{i_0i_1}p_{i_1i_2}...p_{i_{n-1}i_n}$

Pf.以下のような式変形を繰り返せば示せる

$$\begin{aligned}&P(X_0=i_0,X_1=i_1,X_2=i_2)\\ \overset{\text{条件付き確率}}{=}\ &P(X_0=i_0,X_1=i_1)P(X_2=i_2|X_0=i_0,X_1=i_1)\\ \overset{\text{Markov 性から}}{=}\ &P(X_0=i_0,X_1=i_1)P(X_2=i_2|X_1=i_1)\\ =\ &P(X_0=i_0,X_1=i_1)p_{12}\end{aligned}$$

Th 1.5

推移確率行列Pの n 乗を$P^n = \left(p_{ij}^{(n)}\right)_{i,j\in S}$とすると、

$$P(X_0 = i, X_n = j) = v_i p_{ij}^{(n)} \quad (\forall i, j \in S)$$

この定理が意味するところ:

初期分布$\boldsymbol{p}^{(0)}$が$\boldsymbol{v}$で与えられた時、$\boldsymbol{p}^{(n)} = \boldsymbol{p}^{(n-1)}P = ... = \boldsymbol{v}P^n$で計算できる

$$\begin{pmatrix} p_1^{(n)} & p_2^{(n)} & ... & p_N^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1^{(n-1)} & p_2^{(n-1)} & ... & p_N^{(n-1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & ...p_{1N} \\ p_{21} & p_{22} & ...p_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ p_{N1} & p_{N2} & ...p_{NN} \end{pmatrix}$$

定常分布

状態空間$S = \{1, 2, ..., N\}$,推移確率行列$P = \left(p_{ij}\right)_{i,j \in S}$の Markov 連鎖$\{X_n\}$で、

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

が成り立つ分布$\boldsymbol{\pi}$を、定常分布という。

この時、任意の n に対し、$\boldsymbol{\pi} P^n = \boldsymbol{\pi}$が成り立つ

定常分布 (ii)

Th1.6 定常分布と二重確率行列の関係

二重確率行列:$\sum_{i\in S} p_{ij} = 1$を満たす推移確率行列 P

状態空間が$S = \{1, 2, ..., N\}$である Markov 連鎖が、S 上の一様分布

$$(\pi_1, \pi_2, ..., \pi_n) = \left(\frac{1}{N}, \frac{1}{N}, ..., \frac{1}{N}\right)$$

を定常分布にもつための必要十分条件は、推移確立行列$P = \left(p_{ij}\right)_{i,j\in S}$が二重確率行列であること

Pf.S 上の一様分布が定常分布であるとは、任意の$j \in S$に対し、$\sum_{i\in S}\left(\frac{1}{N}\right)p_{ij} = \left(\frac{1}{N}\right)$が成り立つこと

これは$\sum_{i\in S} p_{ij} = 1$,すなわち二重確率行列であることと同値

N 頂点完全グラフ上の単純ランダムウォーク

$N \geq 3$,状態空間$S = \{1, 2, ..., N\}$とし、推移確率行列$P = \left(p_{ij}\right)_{i,j \in S}$が、

$$p_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{N-1} & (j \neq i) \\ 0 & (j = 1) \end{cases}$$

で与えられる Markov 連鎖

現在の状態以外の(N-1)個の状態を等確率で選んで推移することを意味する

P は対称行列なので二重確率行列となり、Th1.6 から一様分布 $(\frac{1}{N} \ \frac{1}{N} \ \cdots \ \frac{1}{N})$を定常分布としてもつ

可逆な定常分布

状態空間$S=\{1,2,...,N\}$上の Markov 連鎖の推移確率行列$P=\left(p_{ij}\right)_{ij\in S}$に対し、分布$\boldsymbol{\pi}=\left(\pi_i\right)_{i\in S}$が下式の詳細釣り合い条件

$$\pi_i p_{ij}=\pi_j p_{ji}\ (\forall i,j\in S)$$

を満たすとき、$\boldsymbol{\pi}$は P に対し可逆という

Th1.7 可逆ならば定常分布

状態空間$S=\{1,2,...,N\}$上の Markov 連鎖の推移確率行列$P=\left(p_{ij}\right)_{i,j\in S}$について、分布$\boldsymbol{\pi}=\left(\pi_i\right)_{i\in S}$が P に対して可逆であるとき、$\boldsymbol{\pi}$は P に対する定常分布となる

Pf.任意の$j\in S$に対し、

$$\sum_{i\in S}\pi_i p_{ij}\overset{\text{釣り合い条件}}{=}\sum_{i\in S}\pi_j p_{ji}=\pi_j\sum_{i\in S}p_{ji}\overset{\text{推移確率行列の定義}}{=}\pi_j\cdot 1=\pi_j$$

$\sum_{i\in S}\pi_i p_{ij}=\pi_j$定常分布の条件そのもの

可逆な定常分布 (ii)

Th1.8

二状態の Markov 連鎖においては、全ての定常分布が可逆

Pf. p18 より、推移確率行列$P = \begin{pmatrix} 1-a & a \\ b & 1-b \end{pmatrix}$に対する定常分布は、
$\begin{pmatrix} \frac{b}{a+b} & \frac{a}{a+b} \end{pmatrix}$

$\pi_1 p_{12} = \pi_2 p_{21}$は自明

Th1.9 (Th1.6 より強い定理)

推移確率行列 P が対称
$\Leftrightarrow$Markov 連鎖が一様分布を可逆な定常分布としてもつ

Pf.状態空間 S 上の一様分布が可逆な定常分布であるとは、
$\forall i, j \in S \left(\frac{1}{N} p_{ij} = \frac{1}{N} p_{ji} \right)$が成立すること。 これは$p_{ij} = p_{ji}$と同値

可逆な定常分布が容易にわかる場合

Th1.10 有限グラフ G 上の単純ランダムウォーク

有限グラフ$G = (V, E)$　(V:頂点集合、E:辺集合)に対し、

$$p_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{\deg(i)} & (j \sim i) \\ 0 & (j \nsim i) \end{cases}$$

で推移確率行列が与えられる確率過程を単純ランダムウォークという (deg:次数　ノードに繋がる辺の数)(隣接するノードに等確率で遷移)

総次数$\Delta := \sum_{i \in V} \deg(i)$とおいた時、

$$\pi_i := \frac{\deg(i)}{\Delta} \quad [i \in V]$$

とすれば$\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)_{i \in V}$は G 上の単純ランダムウォークの可逆な定常分布である

Pf.釣り合い条件を示していく

(i)$i, j \in V$が$i \sim j$を満たすとき

$$\pi_i p_{ij} = \frac{\deg(i)}{\Delta} \cdot \frac{1}{\deg(i)} = \frac{1}{\Delta} = \frac{\deg(j)}{\Delta} \cdot \frac{1}{\deg(j)} = \pi_j p_{ji}$$

(ii)$i, j \in V$が$i \nsim j$を満たすとき

$\pi_i p_{ij} = \frac{\deg(i)}{\Delta} \cdot 0 = 0 = \frac{\deg(j)}{\Delta} \cdot 0 = \pi_j p_{ji}$ である。

(i),(ii)から、$\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)_{i \in V}$は、定義から可逆な定常分布

エーレンフェストモデル

Th1.11 エーレンフェストモデル

N 個の気体分子が入った容器が 2 つの部分に分けられ、単位時間ごとに一つの気体分子が下式に従い移動 (i は一方の分子数)

$$p_{i,i-1} = \frac{i}{N} \qquad (i = 1, 2, ..., N)$$

$$p_{i,i+1} = 1 - \frac{i}{N} (i = 0, 1, ..., N-1)$$

$$p_{ij} = 0 \qquad (\text{上記以外})$$

二項分布$B(N, \frac{1}{2})$はエーレンフェストモデルの可逆な定常分布。

$$\pi_i = \frac{1}{2^N}\binom{N}{i} \quad [i = 0, 1, ..., N]$$

は詳細釣り合い条件を満たし、このモデルの定常分布は他にない

Pf. (i)可逆な定常分布を導出
任意の$i=0,1,...,N-1$に対し、$\pi_i p_{i,i+1}=\pi_{i+1}p_{i+1,i}$(釣り合い条件)が成り立つような分布を求める。この式を変形すれば、

$$\pi_i\left(1-\frac{i}{N}\right)=\pi_{i+1}\frac{i+1}{N}\leftrightarrow\pi_{i+1}=\frac{N-i}{i+1}\pi_i$$

となる。計算すれば、一般に$i=0,...,N$に対し、$\pi_i=\binom{N}{i}\pi_0$となる。
π_0の値は$\boldsymbol{\pi}=(\pi_i)_{i\in S}$を確率分布とするよう、$\sum_{i\in S}\pi_i=1$となるように決めると、$\pi_0=\frac{1}{2^N}$と決まる

$$1=\sum_{i\in S}\pi_i=\pi_0\sum_{i=0}^{N}\binom{N}{i}=\pi_0\sum_{i=0}^{N}\binom{N}{i}1^i1^{N-i}=\pi_0(1+1)^N=\pi_0 2^N$$

(ii)エーレンフェストモデルは、定常分布であれば可逆

$\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)_{i \in S}$が定常分布であるという式は、

$$\pi_0 = \pi_1 \cdot \pi_{1,0}, \quad \pi_i = \pi_{i+1} \cdot p_{i+1,i} + \pi_{i-1} \cdot p_{i,i-1}$$

で、この式は、$p_{i,i+1} + p_{i,i-1} = 1$に注意すれば、

$$\pi_0 \cdot p_{0,1} - \pi_1 \cdot p_{1,0} = 0$$
$$\pi_i \cdot p_{i,i+1} - \pi_{i+1} p_{i+1,i} = \pi_{i-1} \cdot p_{i-1,i} - \pi_i \cdot p_{i,i-1}$$

に変形でき、これは帰納的に

$$\pi_i \cdot \pi_{i,i+1} = \pi_{i+1} \cdot p_{i+1,i} \quad [i = 0, 1, ..., N-1]$$ 釣り合い条件式

に変形できる。

よって、エーレンフェストモデルの定常分布は、可逆なものに限られる