マルコフ連鎖まとめ

@skbtkey

概要

この文書は卒研セミナーでのマルコフ連鎖のセミナーについて，毎回その要点をまとめるものである．気を付けなければいけないと思ったことは詳しく書く．また僕自身にとって簡単であるようなことは省略する．なお用いる教科書は Paul G. Hoel,Sideney C. Port, Charles J. Stone 著の Introduction to Stochastic Processes.

1 Markov Chain

[*1]

1.1 マルコフ性の定義

$\mathcal{J}$ は有限個の状態の集合とする．$\mathcal{J}$ のことを**状態空間**とよぶ．離散時間 $n = 0, 1, 2, \cdots$ が与えられていて X_n はそれぞれの時刻 n における状態を表すものする．$(n \geq 0)$．この状態を数値に対応させることで X_n はある確率空間上の確率変数とみなす．

定義 1.1 (マルコフ性)．確率空間上 (確率測度は $\mathbb{P}$) で定義された確率変数列 $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ がマルコフ性を満たすとは，次を満たすことである．

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} | X_0 = x_0, \cdots, X_n = x_n) = \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n) \tag{1}$$

マルコフ性の式を言葉で説明してみよう．離散時間が与えられていてそれぞれの時刻で様々な状態を取るというモデルがある．計測開始時点から現在までの状態が分かっているとする．このとき，次の計測時点での状態が x_{n+1} であるような確率は，現在の状態のみに依存する．現在の状態さえわかっていれば過去の状態は一つ次の未来がどんな状態であ

[*1] Markov Chain の訳は本によってさまざま．マルコフ系列だったりマルコフ過程だったりします．ここでは読んでいる教科書の用語を直訳することを意識してマルコフ鎖，マルコフ連鎖とします．

るのかという確率には影響を与えない．

定義 1.2. 条件付き確率 $\mathbb{P}(X_{n+1} = y|X_n = x)$ のことを鎖の遷移確率 (transition probabolities of the chain) という．

この文書では変化しない遷移確率 (stationary transition probability) を持つマルコフ鎖を考える．すなわち，$\mathbb{P}(X_{n+1} = y|X_n = x)$ が n に依存しないようなマルコフ鎖のみを考える．n に依存しないとは，もっと具体的に言うと，

$$\mathbb{P}(X_1 = y|X_0 = x) = \mathbb{P}(X_2 = y|X_1 = x) = \cdots = \mathbb{P}(X_{n+1} = y|X_n = x)$$

が成り立つことを意味する．

定義 1.3. (マルコフ鎖の定義) 確率変数列 $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ がマルコフ鎖をなすとは，これらの確率変数たちがマルコフ性をもち，変化しない遷移確率をもつときにいう．

1.2　二つの状態をもつマルコフ鎖

表 1　機械の状態と遷移の確率の様子

nth day	遷移確率	$(n+1)$th day
正常	$\xrightarrow{q}$	故障
	$\xrightarrow{1-q}$	正常
故障	$\xrightarrow{p}$	正常
	$\xrightarrow{1-p}$	故障

ある機械は 1 日の始まりに正常に動くか故障しているかチェックされる．表のように n 日目の状態と $n+1$ 日目の状態の遷移の確率が定義されている．$0 \leq p, q \leq 1$ である．機械が正常である時を 1，故障しているときを 0 とする．$(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ を n 日目の機械の状態を表すとする．このようにすると $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ はマルコフ性を持つ確率変数であると考えられる（あくまでそんな気がする！）．

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = 1|X_n = 0) = p$$

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = 0|X_n = 1) = q$$

$$\mathbb{P}(X_0 = 0) =: \pi_0(0)$$

とおくと，n 日目の状態が $x_n (= 0 \,\mathrm{or}\, 1)$ である確率を計算することができる．

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(X_{n+1} = 0) &= \mathbb{P}(X_n = 0 \,\mathrm{and}\, X_{n+1} = 0) + \mathbb{P}(X_n = 1 \,\mathrm{and}\, X_{n+1} = 0) \\
&= \mathbb{P}(X_n = 0)\mathbb{P}(X_{n+1} = 0 | X_n = 0) + \mathbb{P}(X_n = 1)\mathbb{P}(X_{n+1} = 0 | X_n = 1) \\
&= \cdots \\
&= (1 - p - q)\mathbb{P}(X_n = 0) + q
\end{aligned}$$

というふうに漸化式が得られるので，一般項を求める計算をすると，

$$\mathbb{P}(X_n = 0) = (1 - p - q)^n \pi_0(0) + q \sum_{j=0}^{n-1} (1 - p - q)^j \tag{2}$$

総和を計算すると，

$$\mathbb{P}(X_n = 0) = \frac{q}{p + q} + (1 - p - q)^n \left(\pi_0(0) - \frac{q}{p + q} \right) \tag{3}$$

が得られる．したがって，

$$\mathbb{P}(X_n = 1) = \frac{p}{p + q} + (1 - q - p)^n \left(\pi_0(1) - \frac{p}{q + p} \right) \tag{4}$$

ここで，$p = q = 1$ でも $p = q = 0$ でもないとする．すなわち，$|1 - p - q| < 1$ であるから，$n \to \infty$ とすると，

$$\lim_{n \to \infty} \mathbb{P}(X_n = 0) = \frac{q}{p + q}$$

$$\lim_{n \to \infty} \mathbb{P}(X_n = 1) = \frac{p}{p + q}$$

この機械の例では，先ほども述べたように，その日の機械の状態を指示している確率変数 $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ が本当にマルコフ性を持っているかどうかはわからない．実際，今までの計算でマルコフ性を用いてはいない．ここではこれらの確率変数たちがマルコフ性を持つと仮定して話を進める．すると，次のような計算が可能になる．$n = 2, x_0, x_1, x_2$ は $1, 0$ のいずれかであるとき，

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}(X_0 = x_0, X_1 = x_1, X_2 = x_2) \\
=&\mathbb{P}(X_0 = x_0 \,\mathrm{and}\, X_1 = x_1)\mathbb{P}(X_2 = x_2 | X_0 = x_0 \,\mathrm{and}\, X_1 = x_1) \\
=&\mathbb{P}(X_0 = x_0)\mathbb{P}(X_0 = x_0 | X_1 = x_1)\mathbb{P}(X_2 = x_2 | X_1 = x_1)
\end{aligned}$$

マルコフ性が無ければこの計算の 2 行目から 3 行目への変形はできない．それが意味するのは，$\mathbb{P}(X_0 = x_0, X_1 = x_1, X_2 = x_2)$ は p, q, π_0 を用いて表すことができないということである．

1.3 遷移関数と初期分布

$(X_n)_{n\in\mathbb{N}}, n \geq 0$ を状態空間 $\mathcal{J}$ を持つマルコフ鎖とする．関数 $P(x, y)(x, y \in \mathcal{J})$ を次で定める．

$$P(x, y) = \mathbb{P}(X_1 = y|X_0 = x)\,[x, y \in \mathcal{J}] \tag{5}$$

これを鎖の遷移関数と呼ぶ．当然，

$$P(x, y) \geq 0 \tag{6}$$

$$\sum_y P(x, y) = 1 \tag{7}$$

である．この文書ではマルコフ鎖は変化しない遷移確率をもつとしていたので，すなわち，

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = y|X_n = x) = P(x, y)\,[n \geq 1] \tag{8}$$

が成立する．これと，マルコフ性より，

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = y|X_0 = x_0, \cdots, X_n = x) = P(x, y) \tag{9}$$

が成り立つ．

また，関数 π_0 を次で定義する．

$$\pi_0(x) = \mathbb{P}(X_0 = x)\,[x \in \mathcal{J}] \tag{10}$$

次が成り立つことは明らかである．

$$\pi_0(x) \geq 0 \tag{11}$$

$$\sum_x \pi_0(x) = 1 \tag{12}$$

これらの関数を用いるとマルコフ性を特徴づけすることができる．先ほども書いたように，

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}(X_0 = x_0, X_1 = x_1, X_2 = x_2) \\
=&\mathbb{P}(X_0 = x_0)\mathbb{P}(X_0 = x_0|X_1 = x_1)\mathbb{P}(X_2 = x_2|X_1 = x_1)
\end{aligned}$$

であるから，

$$\begin{aligned}&\mathbb{P}(X_0 = x_0, X_1 = x_1, X_2 = x_2)\\=&\pi_0(x_0)P(x_0, x_1)P(x_1, x_2)\end{aligned}$$

これを帰納的に計算することで，次を得る．

$$\mathbb{P}(X_0 = x_0, \cdots, X_n = x_n) = \pi_0(x_0)P(x_0, x_1)P(x_1, x_2)\cdots P(x_{n-1}, x_n) \tag{13}$$

ここで定義をまとめておく．

定義 1.4 (遷移関数と初期分布)**.** 関数 $P(x, y)\,[x, y \in \mathcal{J}]$ が鎖の遷移関数であるとは，(6)，(7) を満たすことである．関数 $\pi_0(x)\,[x \in \mathcal{J}]$ が初期分布であるとは，(11)，(12) を満たすことである．

コロモゴロフの拡張定理より，遷移関数と初期分布が与えられると，ある確率空間とその空間の上で定義された確率変数列が式 (13) を満たすようなものが存在することを示すことができる．*2

少し計算をすれば，式 (13) が成立するならば，式 (1) が成立することが分かる．よって，あるモデルにおいてマルコフ性が成り立つことを見るならば，式 (13) が成り立つかどうかを見ればよい．*3

1.4 マルコフ連鎖の例

私が読んだ本は 7 つほど例が載っていたが，すべてを書くのは辛いので一部を書きます．

1.4.1 ランダムウォーク

$\xi_1, \xi_2 \cdots$ は整数値の独立な確率変数で各 ξ_i の確率密度関数は f で共通であるものとする．X_0 を整数値の確率変数とし，各 ξ_i と独立であるとする．$X_n = X_0 + \xi_1 + \cdots + \xi_n$ とする．この時，確率変数列 $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ はマルコフ鎖をなし，俗にランダムウォークと呼ばれる．遷移関数はつぎであたえられる．

$$P(x, y) = f(y - x)$$

*2 後で書く

*3 要するに式 (13) が初期分布と遷移関数を用いたマルコフ性の特徴づけである

初期分布 π_0 は X_0 の分布である．マルコフ性を満たすことを確認するために，式 (13) を満たすことを確認する．X_n の定義の式を睨み，X_0 と各 ξ_i が独立であることと，確率密度関数が f であること，遷移関数が上記の式で与えられていることを考えると次のような計算ができる．

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}(X_0 = x_0, X_1 = x_1, \cdots, X_n = x_n) \\
&= \mathbb{P}(X_0 = x_0, \xi_1 = x_1 - x_0, \cdots, \xi_n = x_n - x_{n-1}) \\
&= \mathbb{P}(X_0 = x_0)\mathbb{P}(\xi_1 = x_1 - x_0)\cdots\mathbb{P}(\xi_n = x_n - x_{n-1}) \\
&= \pi_0(x_0)f(x_1 - x_0)\cdots f(x_n - x_{n-1}) \\
&= \pi_0(x_0)P(x_1, x_0)\cdots P(x_n, x_{n-1})
\end{aligned}$$

（ランダムに整数が選ばれるというようなかなり人工的なマルコフ鎖のモデルだなと思うなど）

1.4.2 Gambler's ruin chain

あるギャンブラーが賭けをする．彼ははじめにいくらかお金を持っていて，毎ターンゲームをする．勝利すれば 1 ドル手に入れ，負けたら 1 ドル失う．引き分けはないものとする．ゲームに勝利する確率は p，負ける確率は $q := 1 - p$ とする．所持金が尽きてしまった時，もうそれ以上ゲームができなくなってしまうのでそれ以降ずっと彼の所持金は 0 のままであるとする．X_n を n ターン目のゲーム終了時に彼が持っている所持金とする．この時，(X_n) はマルコフ鎖を成し，遷移関数は次で与えられる．

$$P(x, y) = \begin{cases} p, & (y = x + 1) \\ q, & (y = x - 1) \\ 0, & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{14}$$

状態空間は $\mathbb{N}$ である．ある n で $X_n = 0$ となってしまった場合，すべての $m \geq n$ について $X_m = 0$ のままであることに注意しよう．このような状態を普通 absorbing state という．

定義 1.5 (absorbing state)**.** 状態 $a \in \mathcal{J}$ が absorbing state とは，$P(a, a) = 1$ であること，すなわち $P(a, y) = 0 (y \neq a)$ のときに言う．

1.5 遷移関数を用いたマルコフ鎖の計算

遷移関数を用いてマルコフ鎖における様々な条件付き確率を計算しよう．

命題 1.1.

$$\begin{aligned}&\mathbb{P}(X_{n+1}=x_{n+1},\cdots,X_{n+m}=x_{n+m}|X_0=x_0,\cdots,X_n=x_n)\\=&P(x_n,x_{n+1})\cdots P(x_{n+m-1},x_{n+m})\end{aligned} \tag{15}$$

証明. 左辺を条件付き確率の定義に従って変形し，式 (13) を用いて計算すると右辺を得る. □

式 (15) は次のように書き直しておくと今後便利である.

$$\begin{aligned}&\mathbb{P}(X_{n+1}=y_1,\cdots,X_{n+m}=y_m|X_0=x_0,\cdots,X_{n-1}=x_{n-1},X_n=x)\\=&P(x,y_1)\cdots P(y_{m-1},y_m)\end{aligned} \tag{16}$$

式 (16) と 4(a) [*4] より，$A_0,A_1,\cdots,A_{n-1}\subset\mathcal{J}$ に対して，

$$\begin{aligned}&\mathbb{P}(X_{n+1}=y_1,\cdots,X_{n+m}=y_m|X_0\in A_0,\cdots,X_{n-1}\in A_{n-1},X_n=x)\\=&P(x,y_1)\cdots P(y_{m-1},y_m)\end{aligned} \tag{17}$$

これと，4(b)[*5]より，$B_1,\cdots,B_m\subset\mathcal{J}$ とすると，

$$\begin{aligned}&\mathbb{P}(X_{n+1}\in B_1,\cdots,X_{n+m}\in B_m|X_0\in A_0,\cdots,X_{n-1}\in A_{n-1},X_n=x)\\=&\sum_{y_1\in B_1}\cdots\sum_{y_m\in B_m}P(x,y_1)\cdots P(y_{m-1},y_m)\end{aligned} \tag{18}$$

定義 1.6. x が m ステップで y にうつりゆく確率を返す $m-step$ の遷移関数 $P^m(x,y)$ は次で定義される.

$$P^m(x,y)=\sum_{y_1}\cdots\sum_{y_{m-1}}P(x,y_1)\cdots P(y_{m-1},y_m) \tag{19}$$

ただし，$m=1$ のとき，$P^1(x,y)=P(x,y)$ とし，$m=0$ の時は，

$$P^0(x,y)=\begin{cases}1 & (x=y)\\ 0 & (\text{otherwise})\end{cases}$$

式 (18) で $B_1=\cdots=B_{m-1}=\mathcal{J},B_m=\{y\}$ とすると，右辺が式 (19) の右辺と同じに

[*4] 後で主張を書いておくこと

[*5] これもあとで主張を書いておく

なるから，

$$\mathbb{P}(X_{n+m}=y|X_0\in A_0,\cdots,X_{n-1}\in A_{n-1},X_n=x)=P^m(x,y) \tag{20}$$

この式において $A_0=A_{n-1}=\mathcal{J}$ とおけば，

$$\mathbb{P}(X_{n+m}=y|X_n=x)=P^m(x,y) \tag{21}$$

が得られるし，$A_0=\{z\},A_1=\cdots=A_{n-1}=\mathcal{J}$ とすれば，

$$\mathbb{P}(X_{n+m}=y|X_0=z,X_n=x)=P^m(x,y) \tag{22}$$

が得られる．4(c)*6より，

$$\begin{aligned}P^{n+m}(x,y)&=\mathbb{P}(X_{n+m}=y|X_0=x)\\&=\sum_{z\in\mathcal{J}}\mathbb{P}(X_n=z|X_0=x)\mathbb{P}(X_{n+m}=y|X_0=x,X_n=z)\\&=\sum_{z\in\mathcal{J}}P^n(x,z)\mathbb{P}(X_{n+m}=y|X_0=x,X_n=z)\end{aligned}$$

が分かるから式 (22) を用いると，

$$P^{n+m}(x,y)=\sum_{z\in\mathcal{J}}P^n(x,z)P^m(z,y) \tag{23}$$

とあらわせる．状態空間が有限集合の Markov Chain を考えているなら，式 (23) は P^n を行列 P の n 乗として見てもよいことになる．詳しくは後に語られる．

初期分布も計算に組み込もう．π_0 を Markov Chain の初期分布関数とすると，

$$\begin{aligned}P(X_n=y)&=\sum_{x\in\mathcal{J}}\mathbb{P}(X_0=x,X_n=y)\\&=\sum_{x\in\mathcal{J}}\mathbb{P}(X_0=x)\mathbb{P}(X_n=y|X_0=x)\end{aligned}$$

だから，

$$P(X_n=y)=\sum_{x\in\mathcal{J}}\pi_0(x)P^n(x,y) \tag{24}$$

を得る．遷移関数を使うことで別のアプローチで $\mathbb{P}(X_{n+1}=y)$ を計算することができる．

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(X_{n+1}=y)&=\sum_{x\in\mathcal{J}}\mathbb{P}(X_n=x,X_{n+1}=y)\\&=\sum_{x\in\mathcal{J}}\mathbb{P}(X_n=x)\mathbb{P}(X_{n+1}=y|X_n=x)\end{aligned}$$

*6 主張を書いておく．式変形の一行目から二行目で用いているぽい

より，

$$\mathbb{P}(X_{n+1}=y)=\sum_{x\in\mathcal{J}}\mathbb{P}(X_n=x)P(x,y) \tag{25}$$

という漸化式が得られるので初期分布 $\pi_0(x)$ から始めて帰納的に計算することができる．

ここで新しい記号を導入する．

定義 1.7. $P_x(\cdot)$ は状態 x からスタートする Markov Chain における様々な事象の確率を表すことにする

例えば，$P_x(X_1\neq a, X_2\neq a, X_3=a)$ とは，x からスタートする Markov Chain が時刻 3 で初めて状態 a に到達するような確率を表している．$P_x()$ を用いて式 (18) を次のように書くことができる．

$$\begin{aligned}&\mathbb{P}(X_{n+1}\in B_1,\cdots,X_{n+m}\in B_m|X_0\in A_0,\cdots,X_{n-1}\in A_{n-1},X_n=x)\\=&P_x(X_1\in B_1,\cdots,X_m\in B_m)\end{aligned} \tag{26}$$

1.5.1 Hitting Times

定義 1.8 (Hitting Times)**.** A を $\mathcal{J}$ の部分集合とする．T_A を A の Hitting Time といい，次で定義する．

$$T_A=min(n>0|X_n\in A)$$

ただし，$X_n\in T_A$ となる n がないときは $T_A=\infty$ とする．A が一点集合 $\{a\}$ であったとき，$T_{\{a\}}$ を単に T_a と書くことにする．

T_A は考えている Markov Chain が初めて A と「ぶつかる」時刻とみてよい．次の等式は Hitting Time を扱うときによく使う大切な式である．

補題 1.2.

$$P^n(x,y)=\sum_{m=1}^{n}P_x(T_y=m)P^{n-m}(y,y)$$

証明． $\{T_y = m, X_n = y\} \quad (1 \le m \le n)$ という事象は m ごとに互いに素である．[*7] また，

$$\{X_n = y\} = \bigcup_{m=1}^{n} \{T_y = m, X_n = y\}$$

である．(左辺を T_y の値について分解した．) よって，

$$\begin{aligned}
P^n(x,y) &= P_x(X_n = y) \\
&= \sum_{m=1}^{n} P_x(T_y = m, X_n = y) \\
&= \sum_{m=1}^{n} P_x(T_y = m)\mathbb{P}(X_n = y | X_0 = x, T_y = m) \\
&= \sum_{m=1}^{n} P_x(T_y = m)\mathbb{P}(X_n = y | X_0 = x, X_1 \neq y, \cdots, X_{m-1} \neq y, X_m = y) \\
&= \sum_{m=1}^{n} P_x(T_y = m) P^{n-m}(y,y)
\end{aligned}$$

一行目から二行目は各事象は disjoint より．四行目から五行目は式 (22) を適用した． □

例 1.1. a が absorbing state なら $P^n(x,a) = P_x(T_a \le n)$ である．ただし，$P_x(T_a \le n) = \sum_{m=1}^{n} P_x(T_a = m)$ である．実際，$P^{n-m}(a,a) = 1$ であるから補題 1.2 を適用すると，

$$\begin{aligned}
P_x(T_a \le n) &= \sum_{m=1}^{n} P_x(T_a = m) P^{n-m}(a,a) \\
&= \sum_{m=1}^{n} P_x(T_a = m) \\
&= P_x(T_a \le n)
\end{aligned}$$

となる．

$T_y = 1, 2$ のような時に観察すると，次が成り立つことが予想できる．

$$P_x(T_y = n+1) = \sum_{z \neq y} P(x,z) P_z(T_y = n) \quad [n \ge 1] \tag{27}$$

[*7] m が変化するとは T_y の値が変わってしまうことだから，$\{y\}$ の Hitting Time が異なるということ．よって，必ず自傷同士の共通部分は空集合になる

直観的には，まず最初の 1 ステップで y ではない状態 z に行き，そこから z をスタートとする Markov Chain だと思い，その $\{y\}$ の Hitting Time が n，つまり $P_z(T_y = n)$ を考えればよい．式 (26) からも求めることができる．x から始まる Markov Chain を考える．$\mathbb{P}(X_0 = x) = 1$ であることに注意しておくと次の計算ができる．

$$
\begin{aligned}
P_x(T_y = n+1) =& \mathbb{P}(X_0 = x, X_1 \neq y, \cdots, X_n \neq y, X_{n+1} = y) \\
=& \mathbb{P}(X_2 \neq y, \cdots, X_n \neq y, X_{n+1} = y | X_0 = x, X_1 \neq y) \\
& \mathbb{P}(X_0 = x, X_1 \neq y) \\
=& \mathbb{P}(X_2 \neq y, \cdots, X_n \neq y, X_{n+1} = y | X_0 = x, X_1 \neq y) \\
& \mathbb{P}(X_1 \neq y | X_0 = x)\mathbb{P}(X_0 = x) \\
=& \mathbb{P}(X_2 \notin \{y\}, \cdots, X_n \notin \{y\}, X_{n+1} \in \{y\} | X_0 \in \{x\}, X_1 \notin \{y\}) \\
& \mathbb{P}(X_1 \neq y | X_0 = x) \\
=& \sum_{z \neq y} P_z(X_1 \notin \{y\}, \cdots, X_{n-1} \notin \{y\}, X_n \notin \{y\}) P(x, z) \\
=& \sum_{z \neq y} P_z(X_1 \neq y, \cdots, X_{n-1} \neq y, X_n = y) P(x, z) \\
=& \sum_{z \neq y} P_z(T_y = n) P(x, z)
\end{aligned}
$$

1.5.2 遷移行列