

マルコフ連鎖の時間発展・定常分布・極限分布

樋口さぶろお <https://hig3.net>

龍谷大学大学院 先端理工学部研究科 数理・情報科学コース

計算科学特論 L10(2024-11-27 Wed)

最終更新: Time-stamp: "2024-11-27 Wed 08:21 JST hig"

今日の目標

- (定数の) 転置推移確率行列から分布の時間発展を計算できる
- 定常分布, 極限分布を説明できる



L09-Q3

Quiz 解答: マルコフ連鎖の推移確率行列

推移図略.

$$\begin{pmatrix} \frac{4}{7} & \frac{1}{7} & 0 & \frac{2}{7} \\ \frac{2}{7} & \frac{4}{7} & \frac{1}{7} & 0 \\ 0 & \frac{2}{7} & \frac{4}{7} & \frac{1}{7} \\ \frac{1}{7} & 0 & \frac{2}{7} & \frac{4}{7} \end{pmatrix}$$

$$\vec{p}(1) = M\vec{p}(0) = \begin{pmatrix} \frac{4}{7} \\ \frac{2}{7} \\ \frac{2}{7} \\ \frac{1}{7} \end{pmatrix}$$

L09-Q4

Quiz 解答: マルコフ連鎖の推移確率行列

推移図略.

$$\begin{pmatrix} \frac{5}{7} & \frac{1}{7} & 0 & 0 \\ \frac{2}{7} & \frac{4}{7} & \frac{1}{7} & 0 \\ 0 & \frac{2}{7} & \frac{4}{7} & \frac{1}{7} \\ 0 & 0 & \frac{2}{7} & \frac{6}{7} \end{pmatrix}$$

$$\vec{p}(1) = M\vec{p}(0) = \begin{pmatrix} \frac{5}{7} \\ \frac{2}{7} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(まとめると) ルールの $p(x, t)$ の漸化式への変換

「ランダムウォーカーは時刻 a に b から出発, が時刻 $t-1$ に x にいるとき, 時刻 t には, 確率 p で $x+1$ に, 確率 q で $x-1$ に移動, 確率 $1-p-q$ でその場にとどまる」

↓

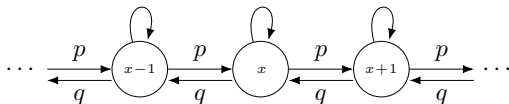
$$P(X(a) = b) = 1,$$

$$X(t) = X(t-1) + R(t), \quad P(R(t) = r) = \begin{cases} q & (r = -1) \\ 1 - p - q & (r = 0) \\ p & (r = 1) \\ 0 & (\text{他}) \end{cases}$$

↓

$$p(x, a) = \begin{cases} 1 & (x = b) \\ 0 & (\text{他}) \end{cases}.$$

$$p(x, t) = p \cdot p(x-1, t-1) + (1-p-q) \cdot p(x, t-1) + q \cdot p(x+1, t-1).$$



推移図 推移=transition

$p(x, t)$ の漸化式

$$p(x, t) = p \cdot p(x-1, t-1) + (1-p-q) \cdot p(x, t-1) + q \cdot p(x+1, t-1)$$

$$p(0, t) = p_{00} \cdot p(0, t-1) + p_{01} \cdot p(1, t-1) + p_{02} \cdot p(2, t-1)$$

$$p(1, t) = p_{10} \cdot p(0, t-1) + p_{11} \cdot p(1, t-1) + p_{12} \cdot p(2, t-1)$$

$$p(2, t) = p_{20} \cdot p(0, t-1) + p_{21} \cdot p(1, t-1) + p_{22} \cdot p(2, t-1)$$

$$\begin{pmatrix} p(0, t) \\ p(1, t) \\ p(2, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} & p_{02} \\ p_{10} & p_{11} & p_{12} \\ p_{20} & p_{21} & p_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(0, t-1) \\ p(1, t-1) \\ p(2, t-1) \end{pmatrix}$$

$$p(x, t) = \sum_{y=0,1,2} p_{xy} \cdot p(y, t-1). \quad (x=0, 1, 2)$$

転置推移確率行列 M , 分布=ベクトル $\vec{p}(t)$ で書くと $(x, y$ が成分番号)

$$\vec{p}(t) = M\vec{p}(t-1).$$

ベクトル $\vec{p}(t)$ は、横 x , 縦 t の表の横 1 行に相当。

この漸化式を解くと, $\vec{p}(t) = M\vec{p}(t-1) = M^2\vec{p}(t-2) = \cdots = M^t\vec{p}(0).$

確率過程とマルコフ連鎖

確率過程 時間 t に依存する確率変数

もちろん反復試行から来る独立な確率変数群 $R(t)$ も時間 t に依存するけど、独立じゃない場合があるかもしれない

離散時間マルコフ連鎖は、次の性質を満たす確率過程.

離散時間 t が離散的. $t = 0, 1, 2, \dots$

マルコフ Markov $\vec{p}(t)$ が直前の時刻の分布 $\vec{p}(t-1)$ だけから決まる. 転置推移確率行列 p_{xy} で表現できる.

連鎖 chain 状態空間 $S \ni x$ が離散的.

時間空間離散のランダムウォークや猫は離散時間マルコフ連鎖の典型例.

離散時間マルコフ連鎖の (確率) 分布は、確率ベクトルで表現できる.

離散時間マルコフ連鎖の遷移確率は、転置確率行列で表現できる.

ここまで来たよ

9 確率過程・マルコフ連鎖

10 マルコフ連鎖の時間発展・定常分布・極限分布

- 確率ベクトル, 転置確率行列
- 定常分布と極限分布
- マルコフ連鎖の時間発展

線形代数のりで確率ベクトル, 転置確率行列の言葉を準備!

定義 (非負ベクトル)

m 次元ベクトル $\begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ \vdots \\ p_{m-1} \end{pmatrix}$ が $p_i \geq 0$ を満たすとき, **非負ベクトル**という.

定義 (確率ベクトル)

非負ベクトル $\begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ \vdots \\ p_{m-1} \end{pmatrix}$ が, **規格化** $\sum_{i=0}^{m-1} p_i = 1$ を満たすとき, **確率ベクトル**という.

線形代数のりで確率ベクトル, 転置確率行列の言葉を準備 II

離散型確率分布 $f(x)$ は, 確率ベクトルと 1 対 1 に対応.

$$\vec{p} = \begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(0) \\ f(1) \\ f(2) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

定義 (非負行列)

($n \times m = 3 \times 2$ の例で)

実行列 $\begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} \\ p_{10} & p_{11} \\ p_{20} & p_{21} \end{pmatrix}$ が $p_{ij} \geq 0$ を満たすとき **非負行列** という.

定義 (転置確率行列)

行列 $M = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} \\ p_{10} & p_{11} \\ p_{20} & p_{21} \end{pmatrix}$ の各列ベクトルが確率ベクトルであるとき, つまり

$\forall j \sum_{i=0}^{n-1} p_{ij} = 1$ であるとき, M を **転置確率行列** という.

推移確率行列

定義 (転置推移確率行列)

マルコフ連鎖に現れる, 転置確率行列

$$M = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} & p_{02} \\ p_{10} & p_{11} & p_{12} \\ p_{20} & p_{21} & p_{22} \end{pmatrix}$$

を, マルコフ連鎖の**転置推移確率行列**という. $m \times m$ 正方行列.

漸化式 $\vec{p}(t) = M\vec{p}(t-1)$ の解

$$\vec{p}(t) = M\vec{p}(t-1) = M^2\vec{p}(t-2) = \cdots = M^t\vec{p}(0).$$

命題 (転置確率行列と確率ベクトルの積)

M が転置確率行列, $\vec{p}$ が確率ベクトルのとき, $M\vec{p}$ も確率ベクトル

証明:

ここまで来たよ

9 確率過程・マルコフ連鎖

10 マルコフ連鎖の時間発展・定常分布・極限分布

- 確率ベクトル, 転置確率行列
- 定常分布と極限分布
- マルコフ連鎖の時間発展

定義 (マルコフ連鎖の定常分布)

M の定めるマルコフ連鎖に対して, $\vec{p} = M\vec{p}$ となる分布 $\vec{p}$ を **定常分布** という.

意味 **自分の言葉でどうぞ**

線形代数の言葉で言うと, 定常分布は, 転置推移確率行列 M の

自分の言葉でどうぞ

建設的心配性大爆発

- 定常分布っていつでもある? $\rightsquigarrow$ Yes
- 固有値 (の絶対値) が 1 より大きな固有ベクトルはあるの? $\rightsquigarrow$ No

状態数 m が有限のとき, **ペロン・フロベニウスの定理**から言える.

定理 (非負行列に対する Peron-Frobenius の定理)

非負正方行列 A に対して

- A は実固有値を持つ. A の最大の実固有値を λ_1 とする.
- λ_1 の固有ベクトルで非負ベクトルであるものが存在する.
- A の任意の固有値 $\lambda_i \in \mathbb{C}$ について $|\lambda_i| \leq \lambda_1$.

正の正方行列に対するものがふつうの Peron-Frobenius の定理.

命題 (固有値 1 の存在)

転置確率行列は 固有値 1 を持つ.

これくらいは証明できる.

定義 (マルコフ連鎖の極限分布)

M の定めるマルコフ連鎖 $\vec{p}(t)$ に対して、 $\lim_{t \rightarrow +\infty} \vec{p}(t) =: \vec{p}(\infty)$ が存在するとき、これを**極限分布** という。

意味 **自分の言葉でどうぞ**

ここまで来たよ

9 確率過程・マルコフ連鎖

10 マルコフ連鎖の時間発展・定常分布・極限分布

- 確率ベクトル, 転置確率行列
- 定常分布と極限分布
- マルコフ連鎖の時間発展

分布の時間発展 I

L10-Q1

Quiz(マルコフ連鎖の時間発展)

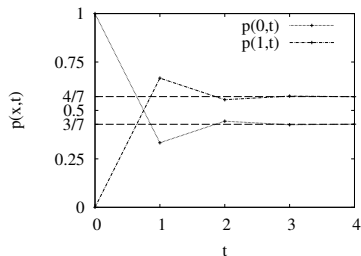
状態空間 $\{0, 1\}$ 上のマルコフ連鎖を考える. 転置推移確率行列は

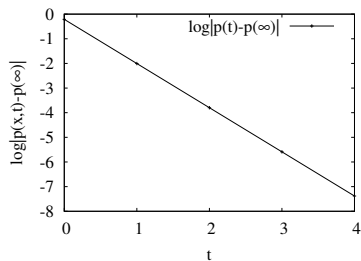
$$M = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{2} \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

- ❶ 初期分布 $\vec{p}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ のとき $\vec{p}(1)$ を求めよう.
- ❷ 定常分布をすべて求めよう.
- ❸ 上の初期分布のとき $\vec{p}(t)$ を求めよう.
- ❹ 上の初期分布のとき極限分布 $\vec{p}(\infty) = \lim_{t \rightarrow +\infty} \vec{p}(t)$ と収束の様子 $\log |\vec{p}(t) - \vec{p}(\infty)|$ を調べよう.
- ❺ 初期分布 $\vec{p}(0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ のとき $\vec{p}(t)$ を求めよう.

このマルコフ連鎖では、 $t \rightarrow +\infty$ で

自分の言葉で





L10-Q2

Quiz(マルコフ連鎖の定常分布)

次の転置推移確率行列を持つ 状態空間 $\{0, 1, 2\}$ 上のマルコフ連鎖を考えよう.

$$M = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{2}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

なお, M の固有値固有ベクトルは $\lambda = 1, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$, $\vec{u} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}$ であることを使ってよい.

- ① 定常分布をすべて求めよう.
- ② 初期分布 $\vec{p}(0) = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ のとき $\vec{p}(t)$ を求めよう.
- ③ 上のとき, $\log |\vec{p}(t) - \vec{p}(\infty)|$ の $t \rightarrow +\infty$ の振る舞いを求めよう.

単純な場合でのマルコフ連鎖の時間発展 I

状態空間 $S = \{0, 1, \dots, m-1\}$ 上のマルコフ連鎖.

転置推移確率行列 M の固有値固有ベクトル $\lambda_i, \vec{u}_i$ ($i = 1, \dots, m$).

仮定

絶対値の大きさの順に並べると (第 1, 第 2, ..., 第 m 固有値とよぶ) 次のようになっているとする.

$$1 = \lambda_1 > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_m| \geq 0.$$

このとき, $\vec{u}_1$ は確率ベクトルにとれて, 解は,

$$\vec{p}(t) = \vec{u}_1 + a_2 \vec{u}_2 \lambda_2^t + a_3 \vec{u}_3 \lambda_3^t + \dots + a_m \vec{u}_m \lambda_m^t.$$

$$\vec{p}(t) = \vec{u}_1 + a_2 \vec{u}_2 \lambda_2^t + a_3 \vec{u}_3 \lambda_3^t + \cdots + a_m \vec{u}_m \lambda_m^t.$$

この単純な場合の性質

- 第1固有値は1. 転置推移確率行列の固有値には、いつでも1が含まれることを示したのだった.

先週の証明

- 第1固有ベクトル $\vec{u}_1$ は 定常分布.

ペロン-フロベニウスの定理

- 極限分布 $\vec{p}(+\infty) = \lim_{t \rightarrow +\infty} \vec{p}(t) = \vec{u}_1.$

自分の言葉でどうぞ

ちなみに、極限分布が存在するなら、それは必ず定常分布. なぜなら

自分の言葉でどうぞ

この単純な場合の性質の続き

- 第2以降の固有値の絶対値が1より小なので **自分の言葉でどうぞ**
第2固有値の絶対値が小ささが、極限分布への収束の速さを決める
- 第2以降の固有ベクトルは **自分の言葉でどうぞ**

これは単純な場合で、一般にはそうでない場合もある

- 単純である＝**既約** (可約でない) かつ **非周期的**
- 単純でない一般的な場合＝**可約** または **周期的**