マルコフ連鎖入門　第1回

永幡幸生
新潟大学
nagahata@ie.niigata-u.ac.jp

2021 September

Markov 連鎖

Markov 連鎖は確率過程の中でも取り扱いやすく、現実問題への応用という観点から考えると、物理現象との相性が良い。
物理現象と呼ばれると少し違和感を感じるかもしれないが、コロナ関係で「8 割削減」というキーワードが出てきたが、この数字は「SIR モデル」と呼ばれる感染症の分野で基本的に使われる Markov 連鎖を用いて導き出した値である。
取り扱いやすいと言ってもやはり奥が深く、いろいろな取り扱い方があるが、一つの方法として線形代数をよく知っていると分かってくることがある。
応用の観点から Markov 連鎖の族を考えそのスケーリング (時空間に関するスケール極限) を考えたい。このスケーリングをどう決めればよいのかということの一つの指標がスペクトルギャップもしくはスペクトルギャップのオーダーである。また逆にこのオーダーの評価があるとその後の解析ができるようになる例がある。
この講義ではなるべく線形代数の観点からこれらおよび関連する話をする。

感染症に関するマルコフ連鎖

SIR モデル

SIR モデルは感染症の分野で基本的に使われる数理モデルであるが、（何も言わなければ）常微分方程式系のモデルである。同じ言葉を使う Markov 連鎖のモデルがあるが、常微分方程式モデルは Markov 連鎖のモデルの対応する物理量の期待値を与えるモデルと考えられる。
SIR モデルの名前の由来は Susceptible 感受性保持者（まだ感染していない者）Infected 感染者 Recovered 免疫保持者（感染して復帰した者）の頭文字である。

感染症に関するマルコフ連鎖

このモデルは、これらの 3 種類の人数の時間発展を表すモデルである。基本的には時刻 0 ではほぼ全ての者は S の状態で、極少数の I の状態の者がいることを想定する。この I の状態の者が S の状態の者と接触して、非感染者 S を感染者 I に変化させる。また I の状態の者は感染から復帰して R の状態に変化する。一度 R になった場合は再度感染することは考えない。(R の人間が再度 S に戻った後に、再感染するモデルも考えられるが、それは SIRS モデルと呼ばれる。)

感染症に関するマルコフ連鎖

Markov 連鎖のモデルは連続時間 Markov 連鎖で、S, I, R を対応する状態の者の数を表すものとしてこの 3 つの物理量を並べたベクトル (S, I, R) を見る。このため状態空間を

$$\mathbf{S} = \{(x, y, z); x, y, z \in \mathbb{Z}, x, y, z \geq 0, x + y + z = N\}$$

ととる。ここで $N \in \mathbb{Z}$ はパラメータで総人口に対応する量である。対応する作用素は 2 つのパラメータ $\beta, \gamma > 0$ を用いて

$$\begin{aligned} Lf((x, y, z)) &= \beta xy\{f((x-1, y+1, z)) - f((x, y, z))\} \\ &\quad + \gamma y\{f((x, y-1, z+1)) - f((x, y, z))\} \end{aligned}$$

と取る。

感染症に関するマルコフ連鎖

この作用素においては、瞬間的に（理想的に）見れば、非感染者が、感染者になる時間や感染者が復帰する時間は分離でき、一つ一つの遷移は別の時間になることを仮定している。
1 行目が非感染者が感染者になることに対応しているが、その比率はその時間における感染者数と非感染者数のそれぞれに比例している。これは（直接的、間接的はおいておくとして）感染者と非感染者が接触することにより感染するという自然な仮定からきており、接触機会が感染者数と非感染者数のそれぞれに比例していることに対応している。
2 行目が感染者が復帰することに対応するが、その比率はその時間における感染者数に比例している。これも各々の感染者が治癒して復帰していくため感染者数に比例しているのは自然な仮定である。

感染症に関するマルコフ連鎖

この講義の範囲内では、この Markov 連鎖の時間発展の様子を見ることや、平均値の時間発展が常微分方程式系

$$\begin{cases} \dot{S}(t) = -\beta S(t)I(t) \\ \dot{I}(t) = \beta S(t)I(t) - \gamma I(t) \\ \dot{R}(t) = \gamma I(t) \end{cases}$$

で表されることは難しいが、キーワードである「8 割削減」の 8 割がどこから出てきたか程度は見ることができる。

感染症に関するマルコフ連鎖

なおこの常微分方程式系を導出するには、次のような事実を使う。
一般的に状態 $(x, y, z) \in \mathbf{S}$ により与えられる物理量
$u = f((x, y, z))$ が L を生成作用素とするマルコフ連鎖
(X_t, Y_t, Z_t) に沿って時間発展するとき $u_s = f((X_s, Y_s, Z_s))$ は

$$u_t - u_0 = \int_0^t \frac{d}{ds} u_s ds = \int_0^t Lf((X_s, Y_s, Z_s))ds + M_t$$

と書いたときに M_t がマルチンゲールになり、平均値を取ることで見えなくなる。
L の線形性から、u_t の平均値の時間発展が

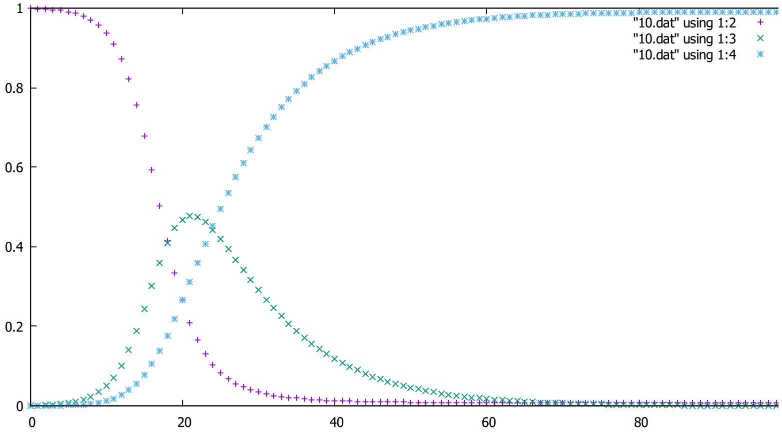
$$\frac{d}{dt} E[u_t] = E[Lf((X_t, Y_t, Z_t))] = Lf((E[X_y], E[Y_t], E[Z_t]))$$

と書けるため、$u = f((x, y, z))$ として 3 種類 $f_1((x, y, z)) = x$, $f_2((x, y, z)) = y$, $f_3((x, y, z)) = z$ を使うことで常微分方程式系を得る。

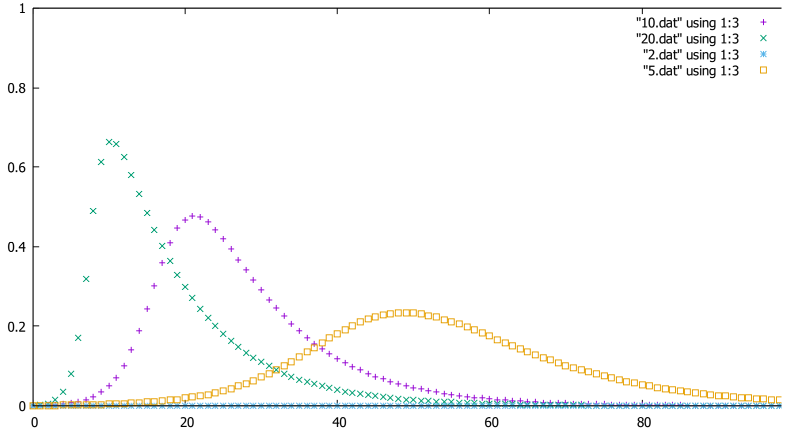
感染症に関するマルコフ連鎖

この常微分方程式系は線形ではないので解析的に解くことは難しいが、時間発展として、非感染者数を表す $S(t)$ は単調減少、感染者数を表す $I(t)$ はある時刻まで増加していきその後減少する、復帰した者の数を表す $R(t)$ は単調増加であることが、予想可能である。
また数値的に解くことは容易で、次のページのグラフは $\beta : \gamma = 5 : 1$ と取った時の $S(t), I(t), R(t)$ の相対比率をグラフにしたもの、次々ページは $I(t)$ だけを取り出し、β を $10, 5, 2.5, 1$ と変化させたもの（$\beta = 1$ のケースはほぼ 0 で良く見えていない。）

感染症に関するマルコフ連鎖



感染症に関するマルコフ連鎖



感染症に関するマルコフ連鎖

SIR モデルにおいて、初期条件として $S \gg I + R$ すなわち初めてこの感染症が発見され、ほとんどの人が感染していない（感染したのち復帰した者も含める）状態を考える。この条件の下でさらに時間が 0 に近い間は、作用素の 1 行目 βxy を βNy と近似してもあまり差がないと思える。
今回のコロナの件のように感染爆発を考えるケースでは、全人口の 0.1% 日本で考えればおおよそ 10 万人感染しないように政策を考える状況であればこの近似を考えることに違和感は感じない。
この近似の下では I だけをみても Markov 連鎖になり、その作用素が

$$Lf(y) = \beta Ny\{f(y+1) - f(y)\} + \gamma y\{f(y-1) - f(y)\}$$

とかけ、$\beta Ny, \gamma y$ をパラメータとして持つ出生死滅過程になる。

感染症に関するマルコフ連鎖

現実の感染症モデルに適用するには、感染をコントロールするパラメータ β と治癒をコントロールするパラメータ γ を推定する必要がある。
さらにこの推定結果から何らかの政策を行うために重要な指標として「実行再生産数」という量があるが、これは (定義自体は異なるが、このモデルにおいては、結果的に)
$R_t = \dfrac{\beta S(t)}{\gamma}$ もしくは感染初期の状況で $S(t) \cong N$ の近似の下で
$R = \dfrac{\beta N}{\gamma}$ で与えられる。
単純に近似のものを使ったときに微分方程式系の感染者数を表す $I(t)$ の方程式は I だけの閉じた方程式

$$\dot{I}(t) = \beta N I(t) - \gamma I(t)$$

となるが、実行再生産数 R を使って、β, N を消すと

$$\dot{I}(t) = \gamma(R-1)I(t)$$

感染症に関するマルコフ連鎖

この方程式

$$\dot{I}(t) = \gamma(R-1)I(t)$$

は簡単に解くことができ初期値 I_0 に対して

$$I(t) = I_0 \exp\{\gamma(R-1)t\}$$

と書ける。
$R=1$ のとき、$I(t)$ は定数 I_0 を取り続け、$R<1$ のとき $I(t)$ は単調減少、$R>1$ のとき $I(t)$ は単調増大になる。
このため「実行再生産数を 1 未満にする」ということが政策で求められる大前提になる。

感染症に関するマルコフ連鎖

2020 年のコロナ関係で「8 割削減」というキーワードが出てきたが、この数は「実行再生産数を 1 未満にする」というための条件として出てきた数である。
当時 (明確には報道されていないと思っているが、会見の言葉から推測して) 実行再生産数の推定値が 2.5 であったと予想される。
当時の知見では有効な対応策が分からなかったこともあり、感染症の対策として一番シンプルな「人と人との接触を減らせば、その割合にほぼ比例して感染率が下がり、結果として実行再生産数も減少する」を採用して、全体として「人と人との接触を 6 割削減」することにより、実行再生産数を 1 未満にすることが採用されたと予想される。

感染症に関するマルコフ連鎖

これをみれば「8 割削減」は多すぎではないかと思われるが、これは数学の問題ではなく、いろいろ数理モデルになる前に落ちてしまった仮定から来る量で、例えば「人と人との接触を減らす」といっても 2 週間以上食料の買い足しができないようでは、感染症対策にはなるかもしれないが、体調を崩すのは明らかで、これら接触分を込めて減らさなければいけないので多めの数を提示することは当たり前のことであろう。

感染症に関するマルコフ連鎖

対応策とこのモデルのパラメータの関係は次のようになる。
(緊急事態宣言などの) 人と人との接触を減らす：β を減らす
(現在はまだ無いようであるが) 特効薬を使う：γ を増やす
ワクチン：モデル自体を変化させ、S から直接 R になる項を増やす。1 つの例として

$$\begin{cases} \dot{S}(t) = -\beta S(t)I(t) - \delta S(t) \\ \dot{I}(t) = \beta S(t)I(t) - \gamma I(t) \\ \dot{R}(t) = \gamma I(t) + \delta S(t) \end{cases}$$

のような微分方程式モデルに変更する。

Markov 連鎖

離散時間と連続時間

「確率と確率過程」の第 9 章で有限マルコフ連鎖に関して多くのことが述べられており、行列を使った離散時間有限状態マルコフ連鎖に関してはこの教科書に基づくことにする。
その上でまず状態空間は有限状態のまま変えずに、時間を連続化することを考える。

Markov 連鎖

<u>離散時間と連続時間</u>
状態空間 S は有限集合（集合 S の要素数を $\#S = r$）として、S 上のマルコフ連鎖の推移確率行列 P が与えられているものとする。
一般的に考えるが、同時に一番簡単な例として $S = \{1, 2\}$ と 2 つの要素だけから成り、推移確率行列として

$$P = \begin{pmatrix} 1-\alpha & \alpha \\ \beta & 1-\beta \end{pmatrix}$$

ただし $0 \leq \alpha, \beta \leq 1, \quad 0 < \alpha + \beta < 2$ を挙げる。
(この例は「確率と確率過程 p.118」で取り扱っているモデルである。)

Markov 連鎖

離散時間と連続時間

この確率行列で与えられる現象は、ある基本時間単位、例えば、1 年、1 日、1 時間、1 分、$\cdots$ など、現実的な時間間隔で状態が遷移する確率を与えている。
現実的な時間間隔が短くなった場合、例えば (技術革新などで) 今の 2 倍、3 倍、$\cdots$ とより多くの観測ができるようになった場合、さらには極限として連続時間で遷移が観測できるようになった場合、このマルコフ連鎖のモデルをどのように変えるのが良いだろうか？

Markov 連鎖

離散時間と連続時間

現実的に同じ現象が見えるかは忘れて、数学的に取り扱いやすい方法は次のようになる。
小さな量 Δt を問題を変化させた後の時間間隔とする。すなわち、もし 2 倍の観測が可能になった場合は $\Delta t = 1/2$ であるし、n 倍の観測が可能になった場合は $\Delta t = 1/n$ となる。
(かなり大雑把に) 状態 $x_i \in S$ から状態 $x_j \in S$, $(x_i \neq x_j)$ への遷移する確率は元々与えられていた $P_{i,j}$ の Δt 倍
$\tilde{P}_{ij} = \tilde{P}_{ij}(\Delta t) = \Delta t P_{ij}$ にする。
確率行列になるように対角成分で調整することにする、具体的には $P_{ii} = 1 - \sum_{j \neq i} P_{ij}$ で与えれれていたものを
$\tilde{P}_{ii} = \tilde{P}_{ii}(\Delta t) = 1 - \Delta t \sum_{j \neq i} P_{ij}$ で与える。
$\tilde{P}(\Delta t)$ で与えた確率行列は時間間隔 Δt で見た時の遷移確率なので、元の確率と比較する場合は $1/\Delta t$ ステップ進めて
$\Delta t \times (1/\Delta t) = 1$ になった $(\tilde{P}(\Delta t))^{1/\Delta t}$ を比較するのが自然。

Markov 連鎖

離散時間と連続時間

2 状態の例で考えると、

$$P = \begin{pmatrix} 1-\alpha & \alpha \\ \beta & 1-\beta \end{pmatrix}, \qquad \tilde{P}(\Delta t) = \begin{pmatrix} 1-\Delta t\alpha & \Delta t\alpha \\ \Delta t\beta & 1-\Delta t\beta \end{pmatrix}$$

になる。対角化をすると

$$\tilde{R} = \begin{pmatrix} 1 & -\Delta t\alpha \\ 1 & \Delta t\beta \end{pmatrix}, \qquad \tilde{R}^{-1} = \frac{1}{\Delta t(\alpha+\beta)} \begin{pmatrix} \Delta t\beta & \Delta t\alpha \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

を用いて

$$\tilde{R}^{-1}\tilde{P}\tilde{R} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1-\Delta t(\alpha+\beta) \end{pmatrix}$$

になる。

Markov 連鎖

離散時間と連続時間

これを使って計算すると

$$\tilde{P}^{1/\Delta t} = \tilde{R}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1-\Delta t(\alpha+\beta) \end{pmatrix}^{1/\Delta t}\tilde{R}^{-1}$$
$$= \begin{pmatrix} 1-\Delta t\alpha S & \Delta t\alpha S \\ \Delta t\beta S & 1-\Delta t\beta S \end{pmatrix}$$

ただし

$$S = S(\Delta t) = \frac{1-\{1-\Delta t(\alpha+\beta)\}^{1/\Delta t}}{\Delta t(\alpha+\beta)}$$

となる。

Markov 連鎖

離散時間と連続時間

Δt は $1/n$ のように $1/$自然数　となるものを考えているように思えるが、数学としてみた場合、小さい量 $(\Delta t < 1)$ である限り意味を持つ。
表記の簡略化をする。
$\tilde{P}$ の定義の仕方から P が与えられていると思うよりは、P の非対角成分が与えらえていて、そこから (P も含めて) $\tilde{P}$ を与えていると考えられるが、表記上は P の対角成分も含めて与えられていて

$$Q = P - I, \quad \tilde{P}(\Delta t) = \Delta t Q + I$$

と与えると統一的に表記できるのに加えて、Q だけ与えれば全てが分かり使い勝手が良い。
一部の分野では「Q 行列」という言葉でこの行列を呼ぶこともある。(ただし連続時間マルコフ連鎖を取り扱う。)

離散時間と連続時間

2 状態の例で考えると、

$$P = \begin{pmatrix} 1-\alpha & \alpha \\ \beta & 1-\beta \end{pmatrix}, \qquad Q = P - I = \begin{pmatrix} -\alpha & \alpha \\ \beta & -\beta \end{pmatrix}$$

になる。

Markov 連鎖

離散時間と連続時間

先にも書いたように $\tilde{P}(\Delta t)$ で与えた確率行列は時間間隔 Δt で見た時の遷移確率なので、元の確率と比較する場合は $1/\Delta t$ ステップ進めて $\Delta t \times (1/\Delta t) = 1$ になった $(\tilde{P}(\Delta t))^{1/\Delta t}$ を比較するのが自然であり、これに $\tilde{P}(\Delta t) = \Delta t Q + I$ の表記を組み合わせると

$$(\tilde{P}(\Delta t))^{1/\Delta t} = (\Delta t Q + I)^{1/\Delta t}$$

と書けるが、 Q, I が行列であることをあまり気にせず、$I \cong 1$ と思って $\Delta t \to 0$ の極限を考えれば

$$(\Delta t Q + I)^{1/\Delta t} \to \exp Q, \quad \Delta t \to 0$$
$$(\Delta t Q + I)^{\tau/\Delta t} \to \exp(\tau Q), \quad \Delta t \to 0$$

となるべきである。

離散時間と連続時間

これは一般的に、A は対角化可能で

$$R^{-1}AR = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

と書けたとする。このとき $\exp tA$, は

$$\exp\{tA\} = R \begin{pmatrix} \exp(t\lambda_1) & & \\ & \ddots & \\ & & \exp(t\lambda_n) \end{pmatrix} R^{-1}$$

と定義することで正当化できる。

Markov 連鎖

離散時間と連続時間

2 状態の例で考えると、

$$P = \begin{pmatrix} 1-\alpha & \alpha \\ \beta & 1-\beta \end{pmatrix}, \qquad Q = P - I = \begin{pmatrix} -\alpha & \alpha \\ \beta & -\beta \end{pmatrix}$$

対角化をすると

$$R = \begin{pmatrix} 1 & -\alpha \\ 1 & \beta \end{pmatrix}, \qquad R^{-1} = \frac{1}{\alpha+\beta} \begin{pmatrix} \beta & \alpha \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

を用いて

$$R^{-1}QR = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -(\alpha+\beta) \end{pmatrix}$$

になる。

Markov 連鎖

離散時間と連続時間

定義通り $\exp tQ$ を計算すると

$$
\exp\{tQ\} = R \begin{pmatrix} \exp(0t) & 0 \\ 0 & \exp\{-(\alpha+\beta)t\} \end{pmatrix} R^{-1}
$$

$$
\frac{1}{\alpha+\beta} \begin{pmatrix} \alpha\exp\{-(\alpha+\beta)t\}+\beta & \alpha-\alpha\exp\{-(\alpha+\beta)t\} \\ \beta-\beta\exp\{-(\alpha+\beta)t\} & \alpha+\beta\exp\{-(\alpha+\beta)t\} \end{pmatrix}
$$

Markov 連鎖

離散時間と連続時間

この $\exp(\tau Q)$ で与えられる行列は確率行列の性質を持つため、$\exp(\tau Q)_{ij}$ を時間 τ で i から j へ遷移する確率として連続時間マルコフ連鎖を考えることができる。

Markov 連鎖

離散時間と連続時間

行列 Q を与えるのと同値な方法を与える。
状態空間 S は集合の要素 $\#S = r$ であり確率行列 P を通して $Q = P - I$ が与えらえていた。これに対して S から実数への関数全体を W と表すと自然に r 次元の線形空間と考えられる。W の元として次の r 個の関数 $f_1, f_2, \ldots, f_r$ を考える
$x_i \in S$ $(i = 1, 2, \ldots, r)$ に対して

$$f_i(x_j) = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

とする。このときこの $f_1, f_2, \ldots, f_r$ は線形空間 W の基底となる。

Markov 連鎖

離散時間と連続時間

線形空間 W から W への線形写像 L を Q を用いて

$$Lf(x_i) = \sum_{j \neq i} Q_{ij}(f(x_j) - f(x_i)), \qquad (i = 1, 2, \ldots, r)$$

と与える。この線形写像 L の基底 $f_1, f_2, \ldots, f_r$ の表現行列を考えると Q になる。
このため行列 Q を与えずに、線形写像 L を与えても良いことが分かる。
行列 Q で書いたときに多くの行列成分が 0 になるような場合は非常に多く、そのような場合は、L で書いた方が書きやすいため、L を使うことが多くなる。
なお L で書く場合には係数として文字 Q を使わないで c_{ij} や $c(i, j)$ のように c を使うことが多い。

離散時間と連続時間

2 状態の例で考えると、

$$P = \begin{pmatrix} 1-\alpha & \alpha \\ \beta & 1-\beta \end{pmatrix}, \qquad Q = P - I = \begin{pmatrix} -\alpha & \alpha \\ \beta & -\beta \end{pmatrix}$$

に対応する L を無理やり書くと

$$\begin{cases} Lf(1) = \alpha\{f(2) - f(1)\} \\ Lf(2) = \beta\{f(1) - f(2)\} \end{cases}$$

になるが、これくらい簡単な場合は Q の方が分かりやすいかもしれない。

離散時間と連続時間

少し形式的ではあるが、単純ランダムウォークは

$$\begin{aligned} Lf(x) &= \frac{1}{2}\{f(x+1)+f(x-1)-2f(x)\} \\ &= \frac{1}{2}\{f(x+1)-f(x)\}+\frac{1}{2}\{f(x-1)-f(x)\} \end{aligned}$$

と単純に書けて便利である。多次元の場合も i 軸方向の単位ベクトル e_i を準備しておけば

$$\begin{aligned} Lf(x) &= \sum_{i=1}^{d} \frac{1}{2d}\{f(x+e_i)+f(x-e_i)-2f(x)\} \\ &= \sum_{i=1}^{d} \left[\frac{1}{2d}\{f(x+e_i)-f(x)\}+\frac{1}{2d}\{f(x-e_i)-f(x)\}\right] \end{aligned}$$

と簡単に書ける。

Markov 連鎖

マルコフ連鎖が与えられたときに定常分布に収束するが、その収束の速さに興味がある。
一番簡単な例として $S = \{1, 2\}$ と 2 つの要素だけから成り、推移確率行列として

$$P = \begin{pmatrix} 1-\alpha & \alpha \\ \beta & 1-\beta \end{pmatrix}$$

ただし $0 \le \alpha, \beta \le 1, \quad 0 < \alpha + \beta < 2$ を取り上げて、(離散時間の場合は似たようなものを計算して P^n 自体は計算していないが、読み替えは可能) 対角化を行い、離散時間の場合は、P^n 連続時間の場合は $\exp(tQ)$ を具体的に計算したが、結果だけを再掲すると、

$$
\begin{aligned}
P^n &= \begin{pmatrix} \dfrac{\beta + \alpha\gamma_2^n}{\alpha+\beta} & \dfrac{\alpha - \alpha\gamma_2^n}{\alpha+\beta} \\ \dfrac{\beta - \beta\gamma_2^n}{\alpha+\beta} & \dfrac{\alpha + \beta\gamma_2^n}{\alpha+\beta} \end{pmatrix}, \\
\exp(tQ) &= \frac{1}{\alpha+\beta} \begin{pmatrix} \alpha\exp\{-\lambda_2 t\} + \beta & \alpha - \alpha\exp\{-\lambda_2 t\} \\ \beta - \beta\exp\{-\lambda_2 t\} & \alpha + \beta\exp\{-\lambda_2 t\} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

ただし $\gamma_2 = 1 - (\alpha+\beta)$, $\lambda_2 = \alpha+\beta$ となる。
このように具体的に計算で来てしまえば、その収束は指数関数的で、P, Q の固有値に対応する γ_2, λ_2 を用いて表すことができる。
状態空間 S が大きくなり、対応して推移確率行列のサイズが大きくなった時には具体的な計算ができるかどうか自体が怪しくなるが、対角化を行い固有値を調べることに意味がありそうである。

少なくとも P が r 次正方行列で

$$R^{-1}PR = \begin{pmatrix} \gamma_1 & & & \\ & \gamma_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \gamma_r \end{pmatrix}$$

と書けている場合には P^n の各成分は

$$\alpha_1\gamma_1^n + \alpha_2\gamma_2^n + \cdots \alpha_r\gamma_r^n$$

と書けるし、

Markov 連鎖

$$R^{-1}QR = \begin{pmatrix} -\lambda_1 & & & \\ & -\lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & -\lambda_r \end{pmatrix}$$

と書けている場合には $\exp(tQ)$ の各成分は

$$\beta_1 \exp\{-\lambda_1 t\} + \beta_2 \exp\{-\lambda_2 t\} + \cdots \beta_r \exp\{-\lambda_r t\}$$

と書けている。

Markov 連鎖

次にあげる Perron-Frobenius の定理は推移確率行列との相性が良い。

定理 (Perron-Frobenius)

A を非負の正方行列として既約とする。このとき以下が成り立つ。
(1) A はスペクトル半径 (固有値の絶対値の最大値) $\rho(A)$ と等しい固有値を持つ。
(2) $\rho(A)$ に対する正の固有ベクトル u が存在する。
(3) A の正の固有ベクトルは (2) の u の定数倍のみ
(4) $\rho(A)$ は A の全ての成分に対して単調増大。
(5) $\rho(A)$ は単純特性根。
(6) A が真に正の正方行列の時は $\rho(A)$ 以外の固有値の絶対値は真に $\rho(A)$ より小さい。

この講義ではこの定理の証明は行わず、結果だけを用いることにする。証明などは例えば斎藤正彦,「線形代数入門」東京大学出版会を参照してほしい。

推移確率行列は非負の正方行列であるので、既約を仮定して Perron-Frobenius の定理を適用してみる。
推移確率行列の性質から $\mathbf{1} = {}^t(1, 1, \ldots, 1)$ に対して

$$P\mathbf{1} = \mathbf{1}$$

になるため、(2),(3) を適用することにより、固有値 1 があり、さらに (1) を適用してスペクトル半径も 1 になる。
推移確率行列自体は真に正にならないが、さらに非周期性を仮定すれば、P^k が真に正になり、(6) が適用でき、 P^k の固有値は 1 と絶対値が 1 未満のものに限られる。このため P も同様に、P の固有値は 1 と絶対値が 1 未満のものに限られる。

Markov 連鎖

連続時間の Q に関しては $Q = P - I$ であったことから、P の固有値を $\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \gamma_r$ とすると Q の固有値は (exp(tQ) の書き方から) 符号を入れ替えて

$$-\lambda_1 = \gamma_1 - 1, -\lambda_2 = \gamma_2 - 1, \ldots, -\lambda_r = \gamma_r - 1$$

と書ける為 $\lambda_1 = 0$ としてよく、他の λ_2 から λ_r の実部は正になることが分かる。

Markov 連鎖

離散時間の場合も、連続時間の場合も "最大固有値" $\gamma_1 = 1$ と $-\lambda_1 = 0$ のおかげで、P^n の各成分及び $\exp(tQ)$ の各成分は 0 でない値に収束する。
この収束の速さは次の "最大固有値" γ_2 と λ_2 によって決まるが、"最大" の意味が、離散時間の P に対しては固有値の絶対値が最大、連続時間の Q に対しては固有値の実部が最大になる。

Markov 連鎖

Perron-Frobenius の定理のおかげで、固有値に関してある程度の情報が得られたが、固有値が複素数のままでは取り扱いずらい。このため全ての固有値が実数になる自然な条件を考える。
「実対称行列は直交行列を用いて実対角行列に対角化される」この命題は非常に有名であるので、証明なしに用いるが、この命題を拡張したものを考える。

定義 (π に対して対称)

P が $\pi = (\pi_1, \pi_2, \ldots, \pi_r) > 0$ に対して対称であるとは全ての $1 \le x, y \le r$ に対して以下を満たすこと

$$\pi_x P_{x,y} = \pi_y P_{y,x}$$

特に対称行列は $\mathbf{1} = (1, 1, \ldots, 1)$ に対して対称。

$$\Pi = \begin{pmatrix} \pi_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \pi_r \end{pmatrix}, \quad \sqrt{\Pi} = \begin{pmatrix} \sqrt{\pi_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{\pi_r} \end{pmatrix}$$

等とおくとき

$$S = \sqrt{\Pi} P \sqrt{\Pi}^{-1}$$

とおくと

Markov 連鎖

$$S = \sqrt{\Pi} P \sqrt{\Pi}^{-1} = \sqrt{\Pi}^{-1} (\Pi P) \sqrt{\Pi}^{-1}$$

と書けるが右辺に出てくる掛け算で与えられる行列が対称行列であることが簡単に調べられ S も対称行列になる。
S が実対称行列なので全ての固有値が実数で対角化できるので Λ を対角行列として $S = R\Lambda R^{-1}$ とすると

$$P = \sqrt{\Pi}^{-1} S \sqrt{\Pi} = (\sqrt{\Pi}^{-1} R)\Lambda(R^{-1}\sqrt{\Pi}) = (\sqrt{\Pi}^{-1} R)\Lambda(\sqrt{\Pi}^{-1} R)^{-1}$$

と書けるため P と S は同じ固有値を持っていることが分かる。

可逆測度

推移確率行列 P が $\tilde{\pi} > 0$ に対して対称であるとき、$\pi = \frac{1}{\sum_i \tilde{\pi}_i} \tilde{\pi}$ と正規化することで、π が P の可逆測度になる。

Markov 連鎖

推移確率行列 P が可逆測度 π を持つ場合を考えることにする。
この設定で、収束の速度を考える場合、P もしくは Q の固有値は全て実数になったが、離散時間の設定では全ての固有値を $1=\gamma_1>\gamma_2\geq\cdots\geq\gamma_r$ とした場合 $|\gamma_2|$ と $|\gamma_r|$ の大きいほうを調べる必要がある。
これに対して連続時間の場合同様に

$$0=\lambda_1=\gamma_1-1>-\lambda_2=\gamma_2-1\geq\cdots\geq-\lambda_r=\gamma_r-1$$

と書いた場合には $\lambda_2(>0)$ だけ調べれば十分である。

Markov 連鎖

スペクトルギャップ

可逆測度を持つ確率行列 P の固有値を順に

$$1 = \gamma_1 > \gamma_2 \geq \cdots \geq \gamma_r$$

と並べた時に

$$\min\{1 - |\gamma_2|, 1 - |\gamma_r|\} = 1 - \max\{|\gamma| : \gamma \text{は} P \text{の固有値で} \gamma \neq 1\}$$

を絶対スペクトルギャップ (absolute spectral gap)

$$1 - \gamma_2$$

をスペクトルギャップ (spectral gap) と呼ぶ。

この講義では連続時間に対応したスペクトルギャップを取り扱う。

Markov 連鎖

なお離散時間の場合でもスペクトルギャップと絶対スペクトルギャップが同じになるように lazy Markov 連鎖を導入することもある。

lazy マルコフ連鎖

P を確率行列とする。P に対応する lazy マルコフ連鎖とは推移確率行列が $\frac{1}{2}(P+I)$ で与えられるものとする。

lazy マルコフ連鎖は元々の マルコフ連鎖が与えられたときに各時間ステップで、さらにコイン投げをして表がでたら元々の マルコフ連鎖に従って動き、裏が出たらその場に留まると思えばよい。このため lazy 怠け者という名前になっている。

連続時間マルコフ連鎖を考えるにあたって、線形作用素を使って考えることにする。
(離散時間の) マルコフ連鎖の推移確率行列 P を与え $Q = P - I$ として

$$Lf(x) = \sum_{y \neq x} Q_{x,y}(f(y) - f(x))$$

と定めたが、逆に $x \neq y$ ならば $C_{x,y} \geq 0$, $C_{x,x} = 0$ となる行列 C に対して

$$Lf(x) = \sum_{y \neq x} C_{x,y}(f(y) - f(x))$$

を考えた時に、

Markov 連鎖

$a = \max\{\sum_{y \neq x} C_{x,y}\}$ として

$$Lf(x) = a \sum_{y \neq x} \frac{C_{x,y}}{a}(f(y) - f(x))$$

とすると $0 \leq \frac{C_{x,y}}{a} \leq 1$ かつ $\sum_{y \neq x} \frac{C_{x,y}}{a} \leq 1$ になるので

$$P_{x,y} = \begin{cases} \frac{C_{x,y}}{a} & x \neq y \\ 1 - \sum_{y \neq x} \frac{C_{x,y}}{a} & x = y \end{cases}$$

が確率行列になる。

一方でこの P に対応する $Q = P - I$ を使えば $C = aQ$ であり

$$\exp(tC) = \exp(atQ)$$

となり、a 倍のスピードアップをこめて考えることができるため $x \neq y$ ならば $C_{x,y} \geq 0$, $C_{x,x} = 0$ となる行列 C に対して

$$Lf(x) = \sum_{y \neq x} C_{x,y}(f(y) - f(x))$$

となる線形作用素および対応する連続時間マルコフ連鎖を考えるものとする。