マルコフ連鎖入門　第 5 回

永幡幸生
新潟大学
nagahata@eng.niigata-u.ac.jp

2021 第 1 学期

Markov 連鎖

このスライド中の議論では状態空間は無限集合でも構わない。

Markov 連鎖

平均再帰時間を考えるためには再帰確率が 1 でなければ ∞ になる。まず再帰性、非再帰性について準備する。
T 到達時刻または再帰時刻で

$$T_x := \min\{n \geq 1; X_n = x\}$$

とする。ただし $\min \emptyset = \infty$ である。
最終的に考えたいのは $E[T_x | X_0 = x]$ であるが
$P(T_x < \infty | X_0 = x) < 1$ ではこの値が ∞ になる。

定義 (再帰、非再帰)

状態 $x \in S$ が再帰的であるとは

$$P(T_x < \infty | X_0 = x) < \infty$$

であること。また状態 x が再帰的でないとき非再帰的であると呼ぶ。

Markov 連鎖

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

の場合に実際に計算してみると (場所と時間が混同するので場所に関しては上から順に a, b, c とする)

$$\begin{aligned} & P(T_a = 1 | X_0 = a) = P(X_1 = a | X_0 = a) = \frac{1}{2} \\ & P(T_a = 2 | X_0 = a) = P(X_2 = a, X_1 \neq a | X_0 = a) \\ & = P(X_2 = a | X_1 = b) P(X_1 = b | X_0 = a) \\ & \quad + P(X_2 = a | X_1 = c) P(X_1 = c | X_0 = a) = 0 \end{aligned}$$

以下同様に考えると

$$P(T_a \geq 2 | X_0 = a) = 0$$

は分かる。

Markov 連鎖

同様に

$$P(T_b = 1|X_0 = b) = P(X_1 = b|X_0 = b) = \frac{1}{2}$$

$$P(T_b = 2|X_0 = b) = P(X_2 = b, X_1 \neq b|X_0 = b)$$
$$= P(X_2 = b|X_1 = a)P(X_1 = a|X_0 = b)$$
$$+ P(X_2 = b|X_1 = c)P(X_1 = c|X_0 = b) = \frac{1}{6}$$

以下同様に考えると $k \geq 2$ で

$$P(T_b = k|X_0 = b) = \frac{1}{6}\left(\frac{2}{3}\right)^{k-2}$$

と計算できるが実際には本質的に 2×2 行列しか見ていないので計算できる。もう少し複雑になると直接的に確率を計算することはほぼ不可能になる。

Markov 連鎖

定理 (再帰的)

状態 x が再帰的である必要十分条件は

$$\sum_{n=0}^{\infty} P(X_n = x | X_0 = x) = \infty$$

である。

証明

$$P_n = P(X_n = x | X_0 = x), \quad f_n = P(T_x = n | X_0 = x)$$

とおく。

Markov 連鎖

$X_n = x$ という事象をはじめて x に戻ってきた時間で分けると

$$\{X_n = x\} = \bigcup_{k=1}^{n} \{X_n = x, T_x = k\}$$

と排反事象に分けられ、

$$\{T_x = k\} = \{X_k = x, X_{k-1} \neq x, X_{k-2} \neq x, \ldots, X_1 \neq x\}$$

と書けるので

これらの式に Markov 性を加えれば

$$
\begin{aligned}
P_n &= P(X_n = x | X_0 = x) \\
&= P(\bigcup_{k=1}^{n} P(\{X_n = x, T_x = k\} | X_0 = x) \\
&= \sum_{k=1}^{n} P(X_n = x, X_k = x, X_{k-1} \neq x, X_{k-2} \neq x, \ldots, X_1 \neq x | X_0 = x) \\
&= \sum_{k=1}^{n} P(X_n = x | X_k = x) \\
&\qquad \times P(X_k = x, X_{k-1} \neq x, X_{k-2} \neq x, \ldots, X_1 \neq x | X_0 = x) \\
&= \sum_{k=1}^{n} P(X_n = x | X_k = x) P(T_x = k | X_0 = x) = \sum_{k=1}^{n} P_{n-k} f_k
\end{aligned}
$$

Markov 連鎖

$P_0 = 1$ を加えて両辺 n に関して和をとり、和の順序交換、変数変換をすることで

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} P_{n-k} f_k$$
$$= 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=k}^{\infty} P_{n-k} f_k = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} f_k \sum_{n=0}^{\infty} P_n$$

と計算できるので少なくとも形式的には

$$\sum_{k=1}^{\infty} f_k = 1 - \frac{1}{\sum_{n=0}^{\infty} P_n}$$

と計算でき定理の主張と一致する。

もちろん $\sum P_n < \infty$ のときに非再帰的という事実に関してはこれで証明になる。しかし $\sum P_n = \infty$ のときには $\sum f_n \neq 0$ くらいしか分からない。
母関数の方法 収束因子をつけて極限を取る。前ページの計算に $|s| < 1$ として s^n を加えてみる。

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n s^n = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}(\sum_{k=1}^{\infty} P_{n-k} f_k)s^n = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=1}^{\infty} P_{n-k} s^{n-k} f_k s^k$$

$$= 1 + \sum_{k=1}^{\infty}\sum_{n=k}^{\infty} P_{n-k} s^{n-k} f_k s^k = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} f_k s^k \sum_{n=0}^{\infty} P_n s^n$$

Markov 連鎖

$|s| < 1$ なので

$$\sum_{k=1}^{\infty} f_k s^k = 1 - \frac{1}{\sum_{n=0}^{\infty} P_n s^n}$$

は正しく $s \to 1$ の極限をとれば $\sum P_n = \infty$ の時にも定理の主張が正しいことが分かる。 $\square$

問題

この極限操作が正しいことを示せ。（正しい理由を説明せよ）

定理 (再帰性と同値類)

$x \leftrightarrow y$ かつ x が再帰的であれば y も再帰的である。

証明

$x \leftrightarrow y$ なので

$$\exists n_1, n_2 \text{ s.t. } P(X_{n_1} = y | X_0 = x) > 0, \ P(X_{n_2} = x | X_0 = y) > 0$$

である。Markov 性から

$$\begin{aligned}
&P(X_{n_2+n+n_1} = y | X_0 = y) \\
&= \sum_{z,w} P(X_{n_2+n+n_1} = y, X_{n+n_1} = z, X_{n_1} = w | X_0 = y) \\
&\geq P(X_{n_2+n+n_1} = y, X_{n+n_1} = x, X_{n_1} = x | X_0 = y) \\
&= P(X_{n_2} = y | X_0 = x) P(X_n = x | X_0 = x) P(X_{n_1} = x | X_0 = y)
\end{aligned}$$

先の定理 (再帰性) を適用する

$$\begin{aligned}
&\sum_{k=0}^{\infty} P(X_k = y | X_0 = y) \\
&\geq \sum_{n=0}^{\infty} P(X_{n_2+n_1+n} = y | X_0 = y) \\
&\geq \sum_{n=0}^{\infty} P(X_{n_2} = y | X_0 = x) P(X_n = x | X_0 = x) P(X_{n_1} = x | X_0 = y) \\
&= \infty
\end{aligned}$$

より y も再帰的である。 $\square$

Markov 連鎖

系 (再帰性と同値類)

$x \leftrightarrow y$ かつ x が非再帰的でであれば y も非再帰的である。

問題

定理の主張の対偶をとることでこの系を示せ。

命題 (再帰性と同値類)

x が再帰的でかつ $x \to y$ であれば $y \to x$ である。

証明

$x \to y$ より $\{n; P(X_n = y|X_0 = x) > 0\} \neq \emptyset$ であるから

$$n = \min\{n; P(X_n = y|X_0 = x) > 0\}$$

とする。すなわち $\{x_1, x_2, \ldots, x_{n-1}\} \cap \{x, y\} = \emptyset$ かつ

$$P(X_n = y, X_{n-1} = x_{n-1}, \ldots, X_1 = x_1|X_0 = x) > 0$$

とできる。

$y \not\to x$ とすると非再帰的であることを示す。
今 $y \not\to x$ とすると $\forall m \geq 1$,

$$P(X_m \neq x, X_{m-1} \neq x, \ldots X_1 \neq 1 | X_0 = y) = 1$$

なので $\forall m \geq 1$ に対して

$$\begin{aligned} &P(X_{n+m} \neq x, X_{n+m-1} \neq x, \ldots, X_{n+1} \neq x, \\ &\quad X_n = y, X_{n-1} = x_{n-1}, \ldots, X_1 = x_1 | X_0 = x) \\ &= P(X_{n+m} \neq x, X_{n+m-1} \neq x, \ldots, X_{n+1} \neq x | X_n = y) \\ &\quad P(X_n = y, X_{n-1} = x_{n-1}, \ldots, X_1 = x_1 | X_0 = x) \\ &= P(X_n = y, X_{n-1} = x_{n-1}, \ldots, X_1 = x_1 | X_0 = x) > 0 \end{aligned}$$

(m によらずに正の値で下から評価できる。)

Markov 連鎖

$F_N = \bigcap_{n=1}^N \{X_n \neq x\}$ とおくと F_N は単調減少列で

$$\{T_x = \infty\} = (\bigcup_{n\geq 1}\{X_n = x\})^c = \bigcap_{n\geq 1}\{X_n = x\}^c = \lim F_N$$

従って

$$\begin{aligned}
&P(T_x = \infty, X_n = y | X_0 = x) \\
&= P(\lim_{m\to\infty}\{X_{n+m} \neq x, \dots, X_{n+1} \neq x, X_n = y | X_0 = x) \\
&= \lim_{m\to\infty} P(\{X_{n+m} \neq x, \dots, X_{n+1} \neq x, X_n = y | X_0 = x) \\
&\geq P(X_n = y, X_{n-1} = x_{n-1}, \dots, X_1 = x_1 | X_0 = x) > 0
\end{aligned}$$

となり x が非再帰的になる。 □

Markov 連鎖

系 (再帰性と同値類)

$\exists y$ s.t. $x \to y$ かつ $y \not\to x$ であれば x は非再帰的である。

問題

命題の主張の対偶をとることでこの系を示せ。

Markov 連鎖

まとめ

- x が再帰的と $\sum_n P(X_n = x|X_0 = x) = \infty$ は同値である。
- $x \leftrightarrow y$ であれば x, y 共に再帰的か、共に非再帰的である。
- $x \to y$ かつ x が再帰的であれば $y \to x$ である。
- $\exists y$ s.t. $x \to y$ かつ $y \not\to x$ であれば x は非再帰的である。

Markov 連鎖

実際に適用してみる。
状態空間が有限集合とする。Perron-Frobenius の定理から結論付けられた命題 (確率行列の極限) を使えば P を既約、周期 1 の確率行列とすると

$$\lim_{n\to\infty} P^n = \begin{pmatrix} \mu \\ \vdots \\ \mu \end{pmatrix}$$

と書け、$\mu > 0$ は唯一の定常分布になる。
すなわち $\exists n_0$ s.t. $\forall n \geq n_0$ ならば $P^n_{x,x} \geq \mu_x/2 > 0$ ととれるため明らかに

$$\sum_n P(X_n = x | X_0 = x) = \sum_n P^n_{x,x} = \infty$$

より全ての x で再帰的になる。

Markov 連鎖

周期が $d \geq 2$ の場合も系として $\exists n$ s.t.

$$P^n = \begin{pmatrix} P_1 & & & \\ & P_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & P_d \end{pmatrix}$$

とブロック行列に分解できて $P_i > 0$ であることを用いれば先の議論と同じように

$$\sum_m P(X_m = x | X_0 = x) = \sum_m P^m_{x,x} \geq \sum_k P^{kn}_{x,x} = \infty$$

より全ての x で再帰的になる。

Markov 連鎖

状態空間が有限集合でない場合、Perron-Frobenius の定理を適用できないので、典型例であるランダムウォークの例を考える。
1 次元のランダムウォークは、状態空間を $\mathbb{Z}$、$0 \leq p \leq 1$ に対して $q = 1 - p$ とおいて、推移確率を

$$P(X_1 = x | X_0 = y) = \begin{cases} p & x = y + 1 \\ q & x = y - 1 \\ 0 & \text{その他} \end{cases}$$

と定義する。
すなわち p をパラメーターとして、現在の位置から一歩右へ行く確率を p、左へ行く確率を $q = 1 - p$ とするものである。

Markov 連鎖

問題

1 次元のランダムウォークにおいて

$$P(X_n = x | X_0 = x) = \begin{cases} {}_nC_{n/2} p^{n/2} q^{n/2} & n \text{ が偶数} \\ 0 & n \text{ が奇数} \end{cases}$$

を示せ。

この問題の結果を使えば

$$\sum_m P(X_m = x | X_0 = x) = \sum_m {}_{2m}C_m p^m q^m = \sum_m \frac{(2m)!}{m!m!} p^m q^m$$

になる。

Markov 連鎖

前ページの最終式にスターリングの公式を適用するために次を計算する。

$$\frac{(2m)!}{m!m!} \sim \frac{\sqrt{2\pi}(2m)^{2m+1/2}e^{-2m}}{\left(\sqrt{2\pi}m^{m+1/2}e^{-m}\right)^2} = \frac{2^{2m}}{\sqrt{\pi}m^{1/2}}$$

従って

$$\sum_m \frac{(2m)!}{m!m!}p^m q^m \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_m \frac{1}{\sqrt{m}}(4pq)^m$$

$q = 1 - p$ であるので $p = 1/2$ ならば $4pq = 1$, $p \neq 1/2$ ならば $4pq < 1$ になる。

Markov 連鎖

問題

$$\sum_m \frac{1}{\sqrt{m}} = \infty$$

$0 \le r < 1$ の場合

$$\sum_m \frac{1}{\sqrt{m}} r^m < \infty$$

を示せ。

この問題の結果より $p = 1/2$ の場合、すなわち平均が 0 であれば再帰的、$p \neq 1/2$ の場合、すなわち平均が 0 でなければ非再帰的になる。

Markov 連鎖

$d \geq 2$ のランダムウォークにおいては、特性関数（フーリエ変換）を用いるのが一般的であるが、結果的に
平均が 0 でなければある $0 \leq r < 1$ と $C > 0$ があって、
$P(X_n = x | X_0 = x) \leq Cr^n$
平均が 0 であればある $C > 0$ があって、
$P(X_{2n} = x | X_0 = x) \sim Cn^{-d/2}$
となる。
この結果から、$d \geq 3$ であればいつでも非再帰的。
$d = 2$ であれば平均が 0 でなければ、平均が 0 であれば再帰的になる。

Markov 連鎖

再帰性に関してのまとめ

規約な Markov 過程において、状態空間が加算集合ならば必ず再帰的になる。
状態空間が非加算集合の典型例である d 次元のランダムウォークは、平均が 0 でなければ非再帰的、平均が 0 の場合 $d = 1, 2$ で再帰的、$d \geq 3$ で非再帰的になる。