マルコフ連鎖入門　第 6 回

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

2021 第 1 学期

Markov 連鎖

平均再帰時間の問題を考えるが次にあげるランダムナイトの問題 (random knight problem) を取り上げる。
チェスは 8×8 の盤上で行なわれる競技であるが、その一つの駒であるナイトは次のような 8 点に移動可能である (黒丸から白丸へ移動可能)。

	○		○	
○				○
		●		
○				○
	○		○	

このナイトが酔っぱらってランダムに動き出した時の平均再帰時間 $E[T_x|X_0 = x]$ を求めたい。但しナイトの動き方は Markov 過程でその推移法則は盤内の移動可能な点に等確率で移動するものとする。

Markov 連鎖

$E[T_x|X_0 = x]$ を定義どおりに $P(T_x = k|X_0 = x)$ を求めることで計算をすることはかなり大変でやる気がおきないが、実は次のようになる。

168	112	84	84	
112	84	56	56	
84	56	42	42	
84	56	42	42	

ただし対称性があるため盤の左上の半分だけを記載している。

Markov 連鎖

同様にキング、クイーンの場合
キング (周り 8 箇所へ移動可能)

○	○	○
○	●	○
○	○	○

,

140	84	84	84	
84	105/2	105/2	105/26	
84	105/2	105/2	105/2	
84	105/2	105/2	105/2	

クイーン (縦横斜めどこまででも移動可能)

○		○		○
	○	○	○	
○	○	●	○	○
	○	○	○	
○		○		○

,

208/3	208/3	208/3	208/3	
208/3	1456/23	1456/23	1456/23	
208/3	1456/23	1456/23	1456/23	
208/3	1456/23	1456/23	1456/23	

Markov 連鎖

ランダムナイトの問題では状態空間は（非常に大きいが）有限集合であるが、以下の議論では無限集合でも構わない。

Markov 連鎖

x を固定する (毎に)

$$\mu_y = \mu_y^x = \sum_{n=0}^{\infty} P(X_n = y, T_x > n | X_0 = x)$$

と定義する。
注意：(1) $x \not\to y$ であれば $\mu_y = 0$ である。
(2) $X_n = x$ ならば $T_x \leq n$ なので $n \geq 1$ では
$P(X_n = x, T_x > n | X_0 = x) = 0$ である。従って

$$\mu_x = P(X_0 = x, T_x > 0 | X_0 = x) = 1$$

である。
(3) x を再帰的とすると $x \to y$ であれば $y \to x$ にもなるので x を再帰的とすると μ は $x \leftrightarrow y$ となる同値類の中でだけ正になり得る。

定理 (定常測度)

x が再帰的であればこの μ は定常測度である。

証明

$y \neq x$ とする。Markov 性を用いて

$$\begin{aligned}
&P(X_{n+1} = z, X_n = y, T_x > n | X_0 = x) \\
&= P(X_{n+1} = z, X_n = y, X_{n-1} \neq x, \dots, X_1 \neq x | X_0 = x) \\
&= P(X_{n+1} = z | X_n = y) P(X_n = y, X_{n-1} \neq x, \dots, X_1 \neq x | X_0 = x) \\
&= P_{y,z} P(X_n = y, T_x > n | X_0 = x)
\end{aligned}$$

と書ける。

Markov 連鎖

これを $y(\neq x)$ に関して和を取る。ただし $y=x$ とすると $P(X_n=y, T_x>n|X_0=x)=0$ になるのでこの項も右辺に加えて

$$\begin{aligned}&\sum_{y\neq x} P(X_{n+1}=z, X_n=y, T_x>n|X_0=x)\\&=\sum_y P_{y,z}P(X_n=y, T_x>n|X_0=x)\end{aligned}$$

この左辺は

$$\begin{aligned}&P(X_{n+1}=z, T_x>n+1|X_0=x), \quad z\neq x \text{ のとき}\\&P(T_x=n+1|X_0=x), \quad z=x \text{ のとき}\end{aligned}$$

である。

Markov 連鎖

さらにこれを n に関して和をとる。
$z \neq x$ のとき $P(X_0 = z | X_0 = x) = 0$ なのでこれを加えて左辺の和は

$$\sum_{n=0}^{\infty} P(X_{n+1} = z, T_x > n+1 | X_0 = x)$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} P(X_n = z, T_x > n | X_0 = x) = \mu_z$$

$z = x$ のときは再帰的なので

$$\sum_{n=0}^{\infty} P(T_x = n+1 | X_0 = x) = P(T_x < \infty | X_0 = x) = 1 = \mu_x$$

一方右辺は和の順序交換を行なうことで z によらず

$$\begin{aligned}
&\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{y} P_{y,z} P(X_n = y, T_x > n | X_0 = x) \\
&= \sum_{y}\sum_{n=0}^{\infty} P(X_n = y, T_x > n | X_0 = x) P_{y,z} = \mu_y P_{y,z}
\end{aligned}$$

従って $\mu = \mu P$ である。 □

定理 (一意性)

P が既約で再帰的であれば定常測度は定数倍を除いてただ一つである。さらに全ての点で正の値をとる。

注意：(1) この定理の再帰的の意味は既約を仮定しているのである点 x で再帰的であれば全ての点で再帰的になるし、ある点 x で非再帰的であればすべての点で非再帰的になる。

Markov 連鎖

注意：(2) 1 次元のランダムウォークの場合定常測度 μ は各 $x \in \mathbb{Z}$ に対して

$$\mu_x = q\mu_{x+1} + p\mu_{x-1}$$

を満たすがこれを 2 項間漸化式として解くとその基底は

$$\mu_x^1 = 1, \quad \mu_x^2 = \left(\frac{p}{q}\right)^x, \quad p \neq q \text{ のとき}$$
$$\mu_x^1 = 1, \quad \mu_x^2 = x, \quad p = q \text{ のとき}$$

となるので $p \neq q$ ではこの 2 つの基底の重ね合わせで $\nu = c_1\mu^1 + c_2\mu^2$, ただし $c_1, c_2 \geq 0$, $(c_1, c_2) \neq 0$ ととれば全て定常測度になるが $p = q$ の場合は $\nu = c_1\mu^1$ ただし $c_1 > 0$ だけが定常測度になる。実際 1 次元のランダムウォークは 1 歩の平均が 0 のとき再帰的でそれ以外では非再帰的になる。

証明
まず x を 1 点固定して作った $\mu = \mu^x$ は P が再帰的であれば定常測度になっている。また $x \to y$ より $\{n; P(X_n = y|X_0 = x) > 0\} \neq \emptyset$ であるから

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

と定義すると

$$0 < P(X_n = y|X_0 = x) = P(X_n = y, T_x > n|X_0 = x) \leq \mu_y$$

を満たしている。

定常測度 $\tilde{\nu}$ が与えられた時には μ と等しいことをいうが、実際には $\exists a \in S,\ C > 0$ s.t. $\tilde{\nu} = C\mu^a$ を示す。この議論を $\tilde{\nu} = \mu^y$ として使うと a は任意にとれ、特に $a = x$ としてもよく、結局全ての定常測度は $\mu = \mu^x$ の定数倍であることが分かる。
定常測度 $\tilde{\nu}$ が与えられたとき少なくとも 1 点 $a \in S$ で $\tilde{\nu}_a > 0$ となるので

$$\nu_x = \frac{\tilde{\nu}_x}{\tilde{\nu}_a}$$

とする。当然 ν も定常測度である。この ν が μ^a と等しいことを示す。

Markov 連鎖

ν も定常測度なので $\nu P = \nu$ をみたすので次のように書けるが、特に a だけを特別視して書くと

$$\begin{aligned} \nu_z &= \sum_y \nu_y P_{y,z} \\ &= \nu_a P_{a,z} + \sum_{y \neq a} \nu_y P_{y,z} \end{aligned}$$

ν の定義から $\nu_a = 1$ なので

$$\nu_z \geq P_{a,z}$$

である。この不等式を上の等式の和の中の ν に代入することで

$$\begin{aligned} \nu_z &\geq P_{a,z} + \sum_{y \neq a} P_{a,y} P_{y,z} \\ &= P_{a,z} + P(X_2 = z, X_1 \neq a | X_0 = a) \\ &= P_{a,z} + P(X_2 = z, T_a > 1 | X_0 = a) \end{aligned}$$

同様にこの不等式を上の等式の和の中の ν に代入することで

$$\begin{aligned}
\nu_z &\geq P_{a,z} + \sum_{y \neq a} P_{a,y} P_{y,z} + \sum_{y \neq a} P_{a,y} P(X_2 = y, T_a > 1 | X_0 = a) \\
&= P_{a,z} + P(X_2 = z, X_1 \neq a | X_0 = a) \\
&\qquad + P(X_3 = z, X_2 \neq a, T_a > 1 | X_0 = a) \\
&= P_{a,z} + P(X_2 = z, T_a > 1 | X_0 = a) \\
&\qquad + P(X_3 = z, T_a > 2 | X_0 = a)
\end{aligned}$$

この代入操作を繰り返すことで、以下を得る。

$$\nu_z \geq P_{a,z} + \sum_{n=2}^{N} P(X_n = z, T_a > n-1 | X_0 = a), \quad \forall N$$

Markov 連鎖

特に $z \neq a$ であれば右辺を書き換えることができ

$$\nu_z \geq \sum_{n=0}^{N} P(X_n = z, T_a > n | X_0 = a) \to \mu_z^a, \quad (N \to \infty)$$

である。また $z = a$ では $\nu_a = 1$ であったので

$$\nu_z \geq \mu_z^a, \quad \forall z$$

である。さらに ν が定常測度であるのでこの不等式とあわせて

$$1 = \nu_a = \sum_y \nu_y P_{y,a}^n \geq \sum_y \mu_y^a P_{y,a}^n = \mu_a^a = 1$$

すなわち $P_{y,a}^n > 0$ となる y では $\nu_a = \mu_a^a$ にならなければいけない。既約性よりすべての y に対して $P_{y,a}^n > 0$ となるので $\nu = \mu^a$ である。 $\square$

定理 (定常分布と再帰時間)

P が既約で定常分布 π を持つならば全ての点は再帰的で

$$\pi_x = \frac{1}{E[T_x|X_0 = x]} = \frac{1}{\sum_{n=0}^{\infty} P(T_x > n|X_0 = x)}$$

注意： $\sum_x \mu_x < \infty$ となる定常測度があれば

$$\pi_x = \frac{\mu_x}{\sum_y \mu_y}$$

とすることで定常分布を持つ。

証明
定理の最終式の 2 つめの等式は次のような一般的な事実による。

問題

以下を示せ
Y を非負整数値を取る確率変数とする時

$$E[Y] = \sum_{n=0}^{\infty} P(Y > n)$$

($\infty = \infty$ も許す。)

再帰性について
π は少なくとも 1 点 x で $\pi_x > 0$ になる。また π は定常分布なので

$$\pi_z = (\pi P^n)_z = \sum_y \pi_y P(X_n = z | X_0 = y) \geq \pi_x P(X_n = z | X_0 = y)$$

と書けるが既約性より $P(X_n = z | X_0 = y) > 0$ となる n が存在する。従って $\pi > 0$ である。
$\pi_z = \sum_y \pi_y P^n_{y,z}$ の両辺を n に関して和を取ると $\pi > 0$ より

$$\infty = \sum_{n=0}^{\infty} \pi_z = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_y \pi_y P^n_{y,z} = \sum_y \pi_y \sum_{n=0}^{\infty} P^n_{y,z}$$

ここで $P^n_{y,z} = P(X_n = z|X_0 = y)$ を Markov 過程がはじめて z に到達した時間で分解することで

$$P^n_{y,z} = P(X_n = z|X_0 = y) = \sum_{k=1}^{n} P(X_n = z, T_z = k|X_0 = y)$$
$$= \sum_{k=1}^{n} P(X_n = z, X_k = z, T_z = k|X_0 = y)$$
$$= \sum_{k=1}^{n} P(X_n = z|X_k = z)P(T_z = k|X_0 = y)$$
$$= \sum_{k=1}^{n} P^{n-k}_{z,z} P(T_z = k|X_0 = y)$$

と書けるためこれを使う。

和の順序交換を行なうことで

$$
\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty} P_{y,z}^{n} &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=1}^{n} P_{z,z}^{n-k} P(T_z = k | X_0 = y) \\
&= \sum_{l=0}^{\infty} P_{z,z}^{l} \sum_{k=1}^{\infty} P(T_z = k | X_0 = y) \\
&= \sum_{l=0}^{\infty} P_{z,z}^{l} P(T_z < \infty | X_0 = y) \leq \sum_{l=0}^{\infty} P_{z,z}^{l}
\end{aligned}
$$

$\sum_y \pi_y = 1$ とあわせて

$$
\infty = \sum_{y} \pi_y \sum_{n=0}^{\infty} P_{y,z}^{n} \leq \sum_{y} \pi_y \sum_{l=0}^{\infty} P_{z,z}^{l} \leq \sum_{l=0}^{\infty} P_{z,z}^{l}
$$

より z の再帰性が分かる。

Markov 連鎖

最後に

$$\pi_x = \frac{1}{\sum_{n=0}^{\infty} P(T_x > n | X_0 = x)}$$

を示す。

先の定理 (定常測度)、(一意性) を用いれば各 x に対して定めた

$$\mu_y^x = \sum_{n=0}^{\infty} P(X_n = y, T_x > n | X_0 = x)$$

と、π を含めても定数倍を除いて等しいので

$$\pi = \frac{1}{\sum_y \mu_y^x} \mu^x, \quad \forall x$$

と書ける。

$\mu_x^x = 1$ であったことと和の交換により

$$\sum_y \mu_y^x = \sum_y \sum_{n=0}^{\infty} P(X_n = y, T_x > n | X_0 = x)$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_y P(X_n = y, T_x > n | X_0 = x)$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} P(T_x > n | X_0 = x)$$

より

$$\pi_x = \frac{1}{\sum_{n=0}^{\infty} P(T_x > n | X_0 = x)}$$

を得る。 $\square$

Markov 連鎖

この定理 (定常分布と再帰時間) を適用すれば定常分布を求めれば その逆数として平均再帰時間が求められる。
Perron-Frobenius の定理を適用すれば (状態空間が有限集合で) 考えている推移確率行列 P が既約であれば定常分布はただ 1 つしかないことが分かり、$\mu P = \mu$ の自明でない解 μ を求めればよいことは分かる。
一方で現実的には、例えばランダムナイトの問題では P は (かなりの数の成分は 0 であるが) 64×64 の行列になり (対称性をうまく使えば 10×10 の行列に減らせるがそれでも)、このサイズの行列の計算を行なう気にはなかなかなれない。(P のかなりの数の成分は 0 になると書いたが、基本変形を繰り返して行くうちに 0 でない成分だらけになることは簡単に予想できる。)
ランダムナイトの例が簡単に計算できるのは次のような理由による。

Markov 連鎖

定義 (グラフ上のランダムウォーク)

Markov 過程の推移確率行列 P が以下を満たすときグラフ上のランダムウォークと呼ぶ。

$P_{x,x} = 0$

$P_{x,y} > 0$ ならば $P_{y,x} > 0$

$x, y, z \in S$ に対して $P_{x,y} > 0$ かつ $P_{x,z} > 0$ ならば $P_{x,y} = P_{x,z}$

注意：これは次のように考える。

P が与えられたとき、状態空間 S を頂点集合とする。(向き、重みをつけない) 辺の集合 E を $P_{x,y} > 0$ (このとき $P_{y,x} > 0$ にもなる) となる (x, y) の組全体とすると自然にグラフ $G = (S, E)$ が定義できる。

この Markov 過程はこのグラフ上を辺にそってランダムに移動するがどの辺を選択するかは現在いる頂点から出ている辺を等確率で選択する。

Markov 連鎖

グラフ上のランダムウォークの推移確率行列 P が与えられた時に $\mu = (\mu_1, \ldots, \mu_n)$ を $\mu_x = \#\{y; P_{x,y} > 0\}$ で与える。
注意：各成分 μ_x はグラフの言葉で書くと x の次数である。

定理 (グラフ上のランダムウォーク)

P はこの μ に対して対称である。
従って μ は定常測度になる。

注意：定常測度が分かれば

$$\pi = \frac{1}{\sum_x \mu_x} \mu$$

と規格化することで定常分布を得られるが、この分母に表れる $\sum_x \mu_x$ はグラフの言葉で書くと (数え方によるが向き無しで考えているので) 辺の総数の 2 倍になる。

証明

x, y によらず $\mu_x P_{x,y} = 1$ である。 $\square$

Markov 連鎖

ランダムナイト、ランダムキング、ランダムクイーンはすべてこのグラフ上のランダムウォークになるため計算は容易で、先にあげたように計算できた。
一方ランダム金、ランダム銀は $P_{x,y} > 0$ ならば $P_{y,x} > 0$ を満たさないため簡単には計算できない。
次のページは数値計算の結果 9×9 で行なっているが右半分が入っていない（対称性がある）。

金 (周り 8 箇所中斜め後ろ以外へ移動可能)

○	○	○
○	●	○
	○	

30.791328	17.815554	17.111911	16.881724	16.8248
35.324925	24.915491	25.076442	25.071163	25.0627
85.940838	67.42103	71.810424	73.470653	73.8932
215.529198	179.831729	201.712943	212.137365	215.112
550.125457	476.83005	558.232434	603.699589	617.821
1419.270985	1261.152818	1527.8363	1696.096853	1752.161
3681.111795	3328.221102	4149.011752	4722.384145	4924.695
9499.054514	8719.120537	11269.92047	13163.67467	13854.67
29920.38808	28154.66878	38005.94435	45254.73054	47919.13

Markov 連鎖

銀 (周り 8 箇所中、横、後ろ以外へ移動可能)

○	○	○
	●	
○		○

67.813349	45.504115	44.201301	45.805548	45.524978
49.629111	24.907000	27.663759	27.158334	27.633778
72.368415	43.904072	40.570712	42.020332	41.348125
121.449120	65.709962	65.736386	63.129401	64.097269
185.413674	106.341529	99.792808	99.383662	97.215698
296.189600	163.363762	157.864619	151.766057	152.140169
461.498716	258.665768	242.750465	236.878209	232.707452
742.552272	405.113035	376.585647	361.925390	359.450153
2025.565173	1020.418715	955.758462	919.546091	904.813474