離散数理工学　第 9 回

離散確率論：マルコフ連鎖 (基礎)

岡本 吉央
okamotoy@uec.ac.jp

電気通信大学

2025 年 1 月 7 日

最終更新：2024 年 12 月 21 日　23:10

今日の目標

今日の目標

マルコフ連鎖について以下ができるようになる

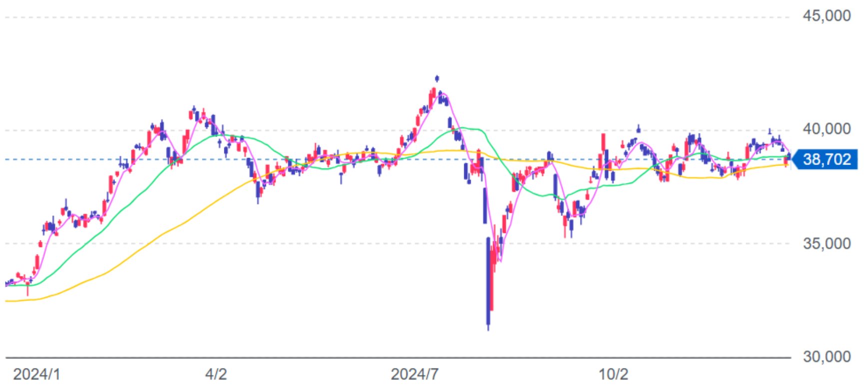
- 推移行列と状態遷移図を用いてマルコフ連鎖が表現できる
- チャップマン・コルモゴロフ方程式を用いて，
マルコフ連鎖における時間発展を表現できる
- 定常分布をマルコフ連鎖の極限と正しく関連付けられる

この講義で扱うマルコフ連鎖は
「斉次 離散時間 有限状態 マルコフ連鎖」と呼ばれるもの

考えたいこと

時間発展とともに変動する事象を確率によってモデル化および解析

例：株価



https://finance.yahoo.co.jp/stocks/

考えたいこと

時間発展とともに変動する事象を確率によってモデル化および解析

例：天気

2023 年 11 月 (東京)

日	月	火	水	木	金	土
			1 23.1℃ 13.1℃	2 24.9℃ 13.0℃	3 24.3℃ 14.3℃	4 26.3℃ 14.4℃
5 23.7℃ 17.6℃	6 25.1℃ 18.0℃	7 27.5℃ 17.0℃	8 21.6℃ 14.6℃	9 21.0℃ 13.4℃	10 17.7℃ 13.5℃	11 15.9℃ 11.3℃
12 11.7℃ 8.0℃	13 15.6℃ 7.9℃	14 18.3℃ 5.9℃	15 14.3℃ 9.8℃	16 17.6℃ 7.8℃	17 13.6℃ 9.8℃	18 17.6℃ 7.4℃
19 19.4℃ 5.9℃	20 18.0℃ 7.5℃	21 17.6℃ 6.7℃	22 19.5℃ 7.4℃	23 21.2℃ 9.8℃	24 24.2℃ 10.6℃	25 13.5℃ 8.4℃
26 9.5℃ 5.3℃	27 15.7℃ 7.4℃	28 22.5℃ 8.6℃	29 17.6℃ 6.6℃	30 16.8℃ 7.9℃		

Last Update:2023-12-04 10:09:05

2023 年 12 月 (東京)

日	月	火	水	木	金	土
					1 12.6℃ 6.4℃	2 13.1℃ 4.1℃
3 15.2℃ 4.1℃	4 14.3℃ 4.7℃	5 10.3℃ 5.7℃	6 16.4℃ 7.1℃	7 19.9℃ 7.1℃	8 17.8℃ 6.0℃	9 17.2℃ 6.4℃
10 19.7℃ 7.2℃	11 16.0℃ 11.3℃	12 15.4℃ 9.7℃	13 15.1℃ 7.3℃	14 14.1℃ 6.5℃	15 20.2℃ 7.1℃	16 21.1℃ 10.8℃
17 17.2℃ 5.9℃	18 11.5℃ 3.8℃	19 10.6℃ 3.4℃	20 13.5℃ 4.6℃	21 13.1℃ 3.3℃	22 10.1℃ 1.5℃	23 10.6℃ 0.1℃
24 8.8℃ 2.0℃	25 12.1℃ 1.0℃	26 13.2℃ 2.6℃	27 12.6℃ 4.3℃	28 10.8℃ 4.4℃	29 13.8℃ 2.2℃	30 14.4℃ 4.4℃
31 12.7℃ 5.8℃						

Last Update:2024-01-02 09:54:43

https://kishojin.weathermap.jp/

目次

マルコフ連鎖：例

次の状況を考える

- ある街の天気は「晴れ (F)」,「曇り (C)」,「雨 (R)」のいずれか
- 天気は毎日，確率的に変わる
  - 晴れの日の翌日の天気が晴れである確率 $= 1/2$
  - 晴れの日の翌日の天気が曇りである確率 $= 1/3$
  - 晴れの日の翌日の天気が雨　である確率 $= 1/6$
  - 曇りの日の翌日の天気が晴れである確率 $= 1/3$
  - 曇りの日の翌日の天気が曇りである確率 $= 1/3$
  - 曇りの日の翌日の天気が雨　である確率 $= 1/3$
  - 雨　の日の翌日の天気が晴れである確率 $= 1/4$
  - 雨　の日の翌日の天気が曇りである確率 $= 1/2$
  - 雨　の日の翌日の天気が雨　である確率 $= 1/4$
- 問：今日が雨であるとき，2 日後も雨である確率はどれだけか？

ポイント

次の日の天気 (に関する確率) は，前の日の天気だけから決まる

マルコフ連鎖：例 — 推移行列

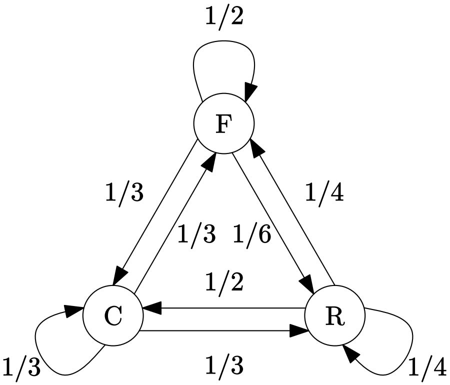
見にくいので，行列で表現する

$$
\boldsymbol{P} = \begin{array}{c c} & \begin{array}{ccc} \mathrm{F} & \mathrm{C} & \mathrm{R} \end{array} \\ \begin{array}{c} \mathrm{F} \\ \mathrm{C} \\ \mathrm{R} \end{array} & \begin{pmatrix} 1/2 & 1/3 & 1/6 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{pmatrix} \end{array}
$$

「行」から「列」へ推移する

マルコフ連鎖：例 — 状態遷移図

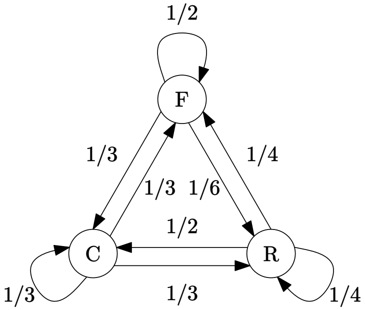
見にくいので，状態遷移図で表現する



「始点」から「終点」へ推移する

マルコフ連鎖：2 日後が雨である確率

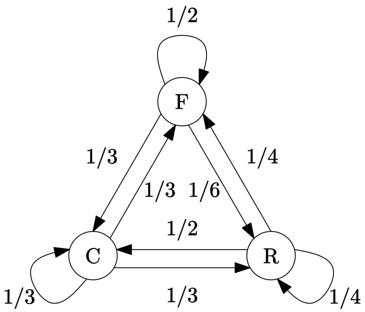
$\boxed{\text{計算したい確率は } \Pr(2 \text{ 日後が雨} \mid \text{今日が雨})}$



マルコフ連鎖：2 日後が雨である確率

計算したい確率は Pr(2 日後が雨 | 今日が雨)

$$
\begin{aligned}
& \Pr(2\text{ 日後が雨} \mid \text{今日が雨}) \\
= \; & \Pr(2\text{ 日後が雨} \mid 1\text{ 日後が晴れ}) \Pr(1\text{ 日後が晴れ} \mid \text{今日が雨}) \\
& + \Pr(2\text{ 日後が雨} \mid 1\text{ 日後が曇り}) \Pr(1\text{ 日後が曇り} \mid \text{今日が雨}) \\
& + \Pr(2\text{ 日後が雨} \mid 1\text{ 日後が雨}) \Pr(1\text{ 日後が雨} \mid \text{今日が雨})
\end{aligned}
$$

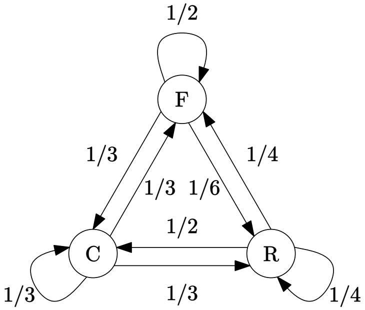


最初の等号が成り立つ理由は後で説明
(チャップマン・コルモゴロフ方程式)

マルコフ連鎖：2 日後が雨である確率

$\boxed{\text{計算したい確率は Pr(2 日後が雨 | 今日が雨)}}$

$$
\begin{aligned}
&\text{Pr(2 日後が雨 | 今日が雨)} \\
= \ &\text{Pr(2 日後が雨 | 1 日後が晴れ) Pr(1 日後が晴れ | 今日が雨)} \\
&+ \text{Pr(2 日後が雨 | 1 日後が曇り) Pr(1 日後が曇り | 今日が雨)} \\
&+ \text{Pr(2 日後が雨 | 1 日後が雨) Pr(1 日後が雨 | 今日が雨)} \\
= \ &\frac{1}{6} \cdot \frac{1}{4} + \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{4}
\end{aligned}
$$

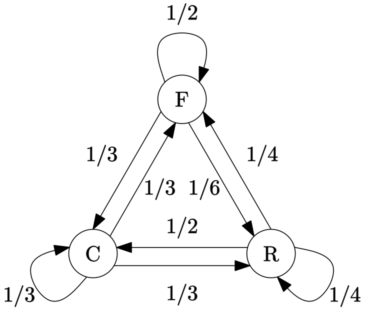


最初の等号が成り立つ理由は後で説明
(チャップマン・コルモゴロフ方程式)

マルコフ連鎖：2 日後が雨である確率

$\boxed{\text{計算したい確率は Pr(2 日後が雨 | 今日が雨)}}$

$$\begin{aligned}
&\Pr(\text{2 日後が雨} \mid \text{今日が雨}) \\
= &\Pr(\text{2 日後が雨} \mid \text{1 日後が晴れ}) \Pr(\text{1 日後が晴れ} \mid \text{今日が雨}) \\
&+ \Pr(\text{2 日後が雨} \mid \text{1 日後が曇り}) \Pr(\text{1 日後が曇り} \mid \text{今日が雨}) \\
&+ \Pr(\text{2 日後が雨} \mid \text{1 日後が雨}) \Pr(\text{1 日後が雨} \mid \text{今日が雨}) \\
= &\frac{1}{6} \cdot \frac{1}{4} + \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{4} \\
= &\frac{13}{48} \quad (\approx 0.271)
\end{aligned}$$



最初の等号が成り立つ理由は後で説明
(チャップマン・コルモゴロフ方程式)

マルコフ連鎖：2 日後が雨である確率 (2)

行列に対する計算で見てみる

$$\boldsymbol{P} = \begin{array}{cc} & \begin{array}{ccc} F & C & R \end{array} \\ \begin{array}{c} F \\ C \\ R \end{array} & \begin{pmatrix} 1/2 & 1/3 & 1/6 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\boldsymbol{P}^2 = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/3 & 1/6 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/3 & 1/6 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{array}{cc} & \begin{array}{ccc} F & C & R \end{array} \\ \begin{array}{c} F \\ C \\ R \end{array} & \begin{pmatrix} 29/72 & 13/36 & 17/72 \\ 13/36 & 7/18 & 1/4 \\ 17/48 & 3/8 & 13/48 \end{pmatrix} \end{array}$$

計算法を思い出せば，なぜそうなるか分かる

目次

設定

設定

- 時刻 $t = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, \ldots$
- X_t：各時刻 t における状態 (確率変数)
- $\mathcal{S}$：状態が取りうる値全体から成る集合 (**状態空間**)
    - この講義において，$\mathcal{S}$ は有限集合
- X_t は履歴 $X_0, X_1, X_2, X_3, \ldots, X_{t-1}$ に依存する (かもしれない)

定義：**確率過程** とは，確率変数の (時間発展により得られる) 列のこと

$$(X_t \mid t \in \mathbb{N})$$

マルコフ連鎖：定義

$X_0, X_1, \ldots$ ：状態空間を $\mathcal{S}$ とする確率変数

定義：マルコフ連鎖とは？

マルコフ連鎖 とは次の条件を満たす確率過程 $(X_t \mid t \in \mathbb{N})$ のこと

任意の $t \in \mathbb{N}$，任意の $x_0, x_1, \ldots, x_t, x_{t+1} \in \mathcal{S}$ に対して

$$
\begin{aligned}
& \Pr(X_{t+1} = x_{t+1} \mid X_0 = x_0, X_1 = x_1, \ldots, X_t = x_t) \\
\overset{(1)}{=} \quad & \Pr(X_{t+1} = x_{t+1} \mid X_t = x_t) \\
\overset{(2)}{=} \quad & \Pr(X_1 = x_{t+1} \mid X_0 = x_t)
\end{aligned}
$$

ただし，$\Pr(X_0 = x_0, X_1 = x_1, \ldots, X_t = x_t) \neq 0$ とする

式の解釈

(1) 時刻 $t+1$ における状態は，時刻 $0, \ldots, t-1$ における状態に依存しない

(2) 状態が x_t から x_{t+1} に推移する確率は，時刻に依存しない

マルコフ連鎖：推移確率

マルコフ連鎖の定義 (式 (2)) から，
任意の $i, j \in \mathcal{S}$ に対して，ある実数 p_{ij} が存在して

$$\begin{aligned} p_{ij} &= \Pr(X_1 = j \mid X_0 = i) \\ &= \Pr(X_2 = j \mid X_1 = i) \\ &= \Pr(X_3 = j \mid X_2 = i) \\ &= \Pr(X_4 = j \mid X_3 = i) \\ &= \Pr(X_5 = j \mid X_4 = i) \\ &= \cdots \end{aligned}$$

p_{ij} を状態 i から状態 j への **推移確率** (あるいは**遷移確率**) と呼ぶ

マルコフ連鎖：推移行列

定義：推移確率 p_{ij} を並べた行列を **推移行列** (あるいは**遷移行列**) と呼ぶ

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & \cdots & p_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n1} & p_{n2} & \cdots & p_{nn} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

ただし，$\mathcal{S} = \{1, 2, \ldots, n\}$ とする

性質：推移行列の持つ性質

- 任意の $i, j \in \mathcal{S}$ に対して，$0 \leq p_{ij} \leq 1$
- 任意の $i \in \mathcal{S}$ に対して，$\displaystyle\sum_{j \in \mathcal{S}} p_{ij} = 1$

この 2 条件を満たす行列を **確率行列** と呼ぶ

逆に，確率行列はマルコフ連鎖の推移行列であると見なせる

マルコフ連鎖：状態遷移図

次のようにして作ったラベル付き有向グラフを **状態遷移図** と呼ぶ

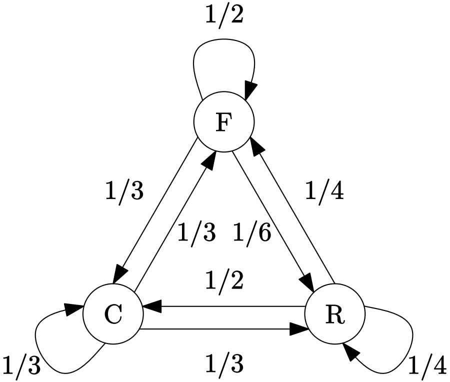
- 頂点集合は状態空間 S
- $p_{ij} > 0$ のとき，i から j へ向けて弧を描く
- その弧の横に p_{ij} を付記する

推移行列

$$\boldsymbol{P} = \begin{array}{c} \\ \mathrm{F} \\ \mathrm{C} \\ \mathrm{R} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \mathrm{F} & \mathrm{C} & \mathrm{R} \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1/2 & 1/3 & 1/6 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{pmatrix} \end{array}$$

注：オートマトンに対する
状態遷移図と少し異なる

状態遷移図



マルコフ連鎖：状態遷移図 — 別の例

次のようにして作ったラベル付き有向グラフを **状態遷移図** と呼ぶ

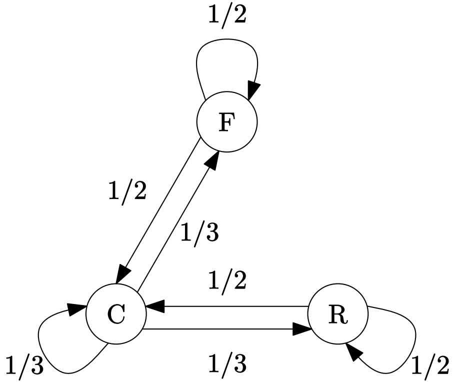
- 頂点集合は状態空間 S
- $p_{ij} > 0$ のとき，i から j へ向けて弧を描く
- その弧の横に p_{ij} を付記する

推移行列

$$P = \begin{array}{c} \\ \mathrm{F} \\ \mathrm{C} \\ \mathrm{R} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \mathrm{F} & \mathrm{C} & \mathrm{R} \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \end{array}$$

注：オートマトンに対する
状態遷移図と少し異なる

状態遷移図



目次

マルコフ連鎖における興味の対象 (の 1 つ)

質問：時刻 t における確率分布

任意の $t \in \mathbb{N}$，任意の $i, j \in \mathcal{S}$ に対して，次の確率は何か？

$$\Pr(X_t = j \mid X_0 = i)$$

つまり，
時刻 0 における状態が i であるとき，時刻 t における状態が j である確率

記法：

$$p_{ij}^{(t)} = \Pr(X_t = j \mid X_0 = i)$$

時刻 1 における確率分布

任意の $i, j \in \mathcal{S}$ に対して

$$\begin{aligned} p_{ij}^{(1)} &= \mathsf{Pr}(X_1 = j \mid X_0 = i) \\ &= p_{ij} \end{aligned}$$

これは簡単

時刻 2 における確率分布 (1)

任意の $i, j \in \mathcal{S}$ に対して，$\mathsf{Pr}(X_0 = i) \neq 0$ のとき，

$$p_{ij}^{(2)} \quad = \quad \mathsf{Pr}(X_2 = j \mid X_0 = i)$$

時刻 2 における確率分布 (1)

任意の $i, j \in \mathcal{S}$ に対して，$\mathrm{Pr}(X_0 = i) \neq 0$ のとき，

$$
\begin{aligned}
p_{ij}^{(2)} &= \mathrm{Pr}(X_2 = j \mid X_0 = i) \\
&= \frac{\mathrm{Pr}(X_2 = j \text{ かつ } X_0 = i)}{\mathrm{Pr}(X_0 = i)}
\end{aligned}
$$

時刻 2 における確率分布 (1)

任意の $i, j \in \mathcal{S}$ に対して，$\mathrm{Pr}(X_0 = i) \neq 0$ のとき，

$$
\begin{aligned}
p_{ij}^{(2)} &= \mathrm{Pr}(X_2 = j \mid X_0 = i) \\
&= \frac{\mathrm{Pr}(X_2 = j \text{ かつ } X_0 = i)}{\mathrm{Pr}(X_0 = i)} \\
&= \frac{1}{\mathrm{Pr}(X_0 = i)} \sum_{k \in \mathcal{S}} \mathrm{Pr}(X_2 = j \text{ かつ } X_0 = i \mid X_1 = k) \, \mathrm{Pr}(X_1 = k)
\end{aligned}
$$

時刻 2 における確率分布 (1)

任意の $i, j \in \mathcal{S}$ に対して，$\Pr(X_0 = i) \neq 0$ のとき，

$$
\begin{aligned}
p_{ij}^{(2)} &= \Pr(X_2 = j \mid X_0 = i) \\
&= \frac{\Pr(X_2 = j \text{ かつ } X_0 = i)}{\Pr(X_0 = i)} \\
&= \frac{1}{\Pr(X_0 = i)} \sum_{k \in \mathcal{S}} \Pr(X_2 = j \text{ かつ } X_0 = i \mid X_1 = k) \Pr(X_1 = k)
\end{aligned}
$$

時刻 2 における確率分布 (2)

$\Pr(X_2 = j$ かつ $X_0 = i \mid X_1 = k) \Pr(X_1 = k)$

時刻 2 における確率分布 (2)

$$\Pr(X_2 = j \text{ かつ } X_0 = i \mid X_1 = k)\Pr(X_1 = k)$$

$$= \quad \Pr(X_2 = j \mid X_0 = i \text{ かつ } X_1 = k)\Pr(X_0 = i \mid X_1 = k)\Pr(X_1 = k)$$

演習問題

任意の事象 A, B, C に対して，$\Pr(B \text{ かつ } C) \neq 0$ のとき

$$\Pr(A \text{ かつ } B \mid C) = \Pr(A \mid B \text{ かつ } C)\Pr(B \mid C)$$

時刻 2 における確率分布 (2)

$$\Pr(X_2 = j \text{ かつ } X_0 = i \mid X_1 = k) \Pr(X_1 = k)$$

$$\begin{aligned} &= \Pr(X_2 = j \mid X_0 = i \text{ かつ } X_1 = k) \Pr(X_0 = i \mid X_1 = k) \Pr(X_1 = k) \\ &= \Pr(X_2 = j \mid X_1 = k) \Pr(X_0 = i \mid X_1 = k) \Pr(X_1 = k) \end{aligned}$$

(マルコフ連鎖の定義式 (1) より)

演習問題

任意の事象 A, B, C に対して，$\Pr(B \text{ かつ } C) \neq 0$ のとき

$$\Pr(A \text{ かつ } B \mid C) = \Pr(A \mid B \text{ かつ } C) \Pr(B \mid C)$$

時刻 2 における確率分布 (2)

$$\Pr(X_2 = j \text{ かつ } X_0 = i \mid X_1 = k)\Pr(X_1 = k)$$

$$\begin{aligned}
&= \Pr(X_2 = j \mid X_0 = i \text{ かつ } X_1 = k)\Pr(X_0 = i \mid X_1 = k)\Pr(X_1 = k) \\
&= \Pr(X_2 = j \mid X_1 = k)\Pr(X_0 = i \mid X_1 = k)\Pr(X_1 = k) \\
&\qquad\qquad \text{(マルコフ連鎖の定義式 (1) より)} \\
&= \Pr(X_1 = j \mid X_0 = k)\Pr(X_0 = i \mid X_1 = k)\Pr(X_1 = k) \\
&\qquad\qquad \text{(マルコフ連鎖の定義式 (2) より)}
\end{aligned}$$

演習問題

任意の事象 A, B, C に対して，$\Pr(B \text{ かつ } C) \neq 0$ のとき

$$\Pr(A \text{ かつ } B \mid C) = \Pr(A \mid B \text{ かつ } C)\Pr(B \mid C)$$

時刻 2 における確率分布 (2)

$$\mathrm{Pr}(X_2 = j \text{ かつ } X_0 = i \mid X_1 = k)\,\mathrm{Pr}(X_1 = k)$$

$$\begin{aligned}
&= \mathrm{Pr}(X_2 = j \mid X_0 = i \text{ かつ } X_1 = k)\,\mathrm{Pr}(X_0 = i \mid X_1 = k)\,\mathrm{Pr}(X_1 = k) \\
&= \mathrm{Pr}(X_2 = j \mid X_1 = k)\,\mathrm{Pr}(X_0 = i \mid X_1 = k)\,\mathrm{Pr}(X_1 = k) \\
&\qquad\qquad \text{(マルコフ連鎖の定義式 (1) より)} \\
&= \mathrm{Pr}(X_1 = j \mid X_0 = k)\,\mathrm{Pr}(X_0 = i \mid X_1 = k)\,\mathrm{Pr}(X_1 = k) \\
&\qquad\qquad \text{(マルコフ連鎖の定義式 (2) より)} \\
&= \mathrm{Pr}(X_1 = j \mid X_0 = k)\,\mathrm{Pr}(X_1 = k \mid X_0 = i)\,\mathrm{Pr}(X_0 = i)
\end{aligned}$$

事実：ベイズの定理

任意の事象 A, B に対して，$\mathrm{Pr}(A) \neq 0$ かつ $\mathrm{Pr}(B) \neq 0$ のとき

$$\mathrm{Pr}(A \mid B)\,\mathrm{Pr}(B) = \mathrm{Pr}(B \mid A)\,\mathrm{Pr}(A)$$

時刻 2 における確率分布 (3)

したがって，

$$
\begin{aligned}
p_{ij}^{(2)} &= \frac{1}{\mathrm{Pr}(X_0 = i)} \sum_{k \in \mathcal{S}} \mathrm{Pr}(X_2 = j \text{ かつ } X_0 = i \mid X_1 = k)\, \mathrm{Pr}(X_1 = k) \\
&= \frac{1}{\mathrm{Pr}(X_0 = i)} \sum_{k \in \mathcal{S}} \mathrm{Pr}(X_1 = j \mid X_0 = k)\, \mathrm{Pr}(X_1 = k \mid X_0 = i)\, \mathrm{Pr}(X_0 = i)
\end{aligned}
$$

時刻 2 における確率分布 (3)

したがって，

$$
\begin{aligned}
p_{ij}^{(2)} &= \frac{1}{\Pr(X_0 = i)} \sum_{k \in \mathcal{S}} \Pr(X_2 = j \text{ かつ } X_0 = i \mid X_1 = k) \Pr(X_1 = k) \\
&= \frac{1}{\Pr(X_0 = i)} \sum_{k \in \mathcal{S}} \Pr(X_1 = j \mid X_0 = k) \Pr(X_1 = k \mid X_0 = i) \Pr(X_0 = i) \\
&= \sum_{k \in \mathcal{S}} \Pr(X_1 = j \mid X_0 = k) \Pr(X_1 = k \mid X_0 = i)
\end{aligned}
$$

時刻 2 における確率分布 (3)

したがって，

$$
\begin{aligned}
p_{ij}^{(2)} &= \frac{1}{\Pr(X_0 = i)} \sum_{k \in \mathcal{S}} \Pr(X_2 = j \text{ かつ } X_0 = i \mid X_1 = k) \Pr(X_1 = k) \\
&= \frac{1}{\Pr(X_0 = i)} \sum_{k \in \mathcal{S}} \Pr(X_1 = j \mid X_0 = k) \Pr(X_1 = k \mid X_0 = i) \Pr(X_0 = i) \\
&= \sum_{k \in \mathcal{S}} \Pr(X_1 = j \mid X_0 = k) \Pr(X_1 = k \mid X_0 = i) \\
&= \sum_{k \in \mathcal{S}} p_{kj} p_{ik}
\end{aligned}
$$

時刻 2 における確率分布 (3)

したがって，

$$
\begin{aligned}
p_{ij}^{(2)} &= \frac{1}{\Pr(X_0 = i)} \sum_{k \in \mathcal{S}} \Pr(X_2 = j \text{ かつ } X_0 = i \mid X_1 = k) \Pr(X_1 = k) \\
&= \frac{1}{\Pr(X_0 = i)} \sum_{k \in \mathcal{S}} \Pr(X_1 = j \mid X_0 = k) \Pr(X_1 = k \mid X_0 = i) \Pr(X_0 = i) \\
&= \sum_{k \in \mathcal{S}} \Pr(X_1 = j \mid X_0 = k) \Pr(X_1 = k \mid X_0 = i) \\
&= \sum_{k \in \mathcal{S}} p_{kj} p_{ik} \\
&= \sum_{k \in \mathcal{S}} p_{ik} p_{kj}
\end{aligned}
$$

つまり，$p_{ij}^{(2)}$ は行列積 $\boldsymbol{P}^2$ の第 i, j 成分に等しい

時刻 t における確率分布：チャップマン・コルモゴロフ方程式

記法：$p_{ij}^{(t)} = \Pr(X_t = j \mid X_0 = i)$

定理：チャップマン・コルモゴロフ方程式

任意の時刻 $t = 0, 1, \ldots$ に対して，

$p_{ij}^{(t)}$ は行列積 $\boldsymbol{P}^t$ の第 i, j 成分に等しい

証明：演習問題 (例えば，t に関する帰納法)

特に，次が成り立つ　(普通はこちらがチャップマン・コルモゴロフ方程式)

任意の時刻 $t, s = 0, 1, \ldots$ に対して，

$$p_{ij}^{(t+s)} = \sum_{k \in \mathcal{S}} p_{ik}^{(t)} p_{kj}^{(s)}$$

行列積の定義と上の定理から証明できる

マルコフ連鎖：2 日後が雨である確率 (再掲)

行列に対する計算で見てみる

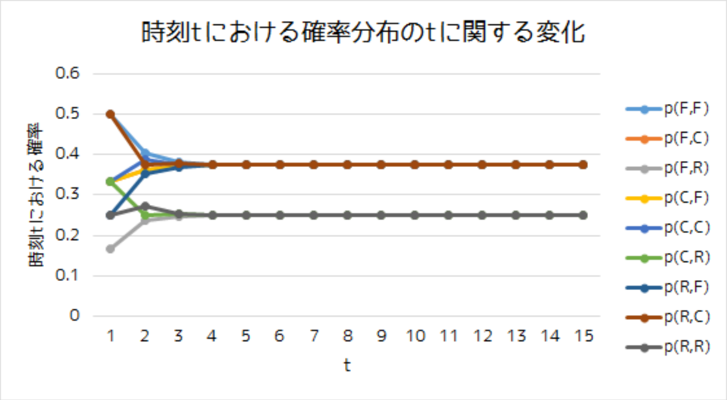
$$
\boldsymbol{P} = \begin{array}{c} \\ \mathrm{F} \\ \mathrm{C} \\ \mathrm{R} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \mathrm{F} & \mathrm{C} & \mathrm{R} \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1/2 & 1/3 & 1/6 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{pmatrix} \end{array}
$$

$$
\boldsymbol{P}^2 = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/3 & 1/6 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ {\color{blue}1/4} & {\color{blue}1/2} & {\color{blue}1/4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/3 & {\color{blue}1/6} \\ 1/3 & 1/3 & {\color{blue}1/3} \\ 1/4 & 1/2 & {\color{blue}1/4} \end{pmatrix}
$$

$$
= \begin{array}{c} \\ \mathrm{F} \\ \mathrm{C} \\ \mathrm{R} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \mathrm{F} & \mathrm{C} & \mathrm{R} \end{array} \\ \begin{pmatrix} 29/72 & 13/36 & 17/72 \\ 13/36 & 7/18 & 1/4 \\ 17/48 & 3/8 & {\color{red}13/48} \end{pmatrix} \end{array}
$$

時刻 t における確率分布：チャップマン・コルモゴロフ方程式 — 時間変化 (1)

先ほどの $\boldsymbol{P}$ から $\boldsymbol{P}^2, \boldsymbol{P}^3, \ldots$ を計算して，各成分をプロット

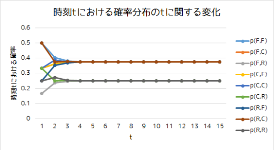


$t \to \infty$ のとき

$$p_{\mathrm{FF}}^{(t)} = p_{\mathrm{CF}}^{(t)} = p_{\mathrm{RF}}^{(t)} \to \frac{3}{8}, p_{\mathrm{FC}}^{(t)} = p_{\mathrm{CC}}^{(t)} = p_{\mathrm{RC}}^{(t)} \to \frac{3}{8}, p_{\mathrm{FR}}^{(t)} = p_{\mathrm{CR}}^{(t)} = p_{\mathrm{RR}}^{(t)} \to \frac{1}{4}$$

時刻 t における確率分布：チャップマン・コルモゴロフ方程式 — 時間変化 (2)

先ほどの $\boldsymbol{P}$ から $\boldsymbol{P}^2, \boldsymbol{P}^3, \ldots$ を計算して，各成分をプロット



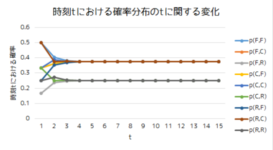
$$\lim_{t \to \infty} \boldsymbol{P}^t = \begin{array}{c c} & \begin{array}{ccc} \mathrm{F} & \mathrm{C} & \mathrm{R} \end{array} \\ \begin{array}{c} \mathrm{F} \\ \mathrm{C} \\ \mathrm{R} \end{array} & \begin{pmatrix} 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \end{pmatrix} \end{array}$$

観察

- $\displaystyle\lim_{t \to \infty} \boldsymbol{P}^t$ が存在する
- $\displaystyle\lim_{t \to \infty} \boldsymbol{P}^t$ の行はすべて同じ

時刻 t における確率分布：チャップマン・コルモゴロフ方程式 — 時間変化 (2)

先ほどの $\boldsymbol{P}$ から $\boldsymbol{P}^2, \boldsymbol{P}^3, \ldots$ を計算して，各成分をプロット



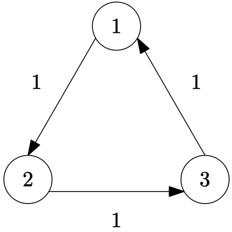
$$
\lim_{t\to\infty} \boldsymbol{P}^t = \begin{array}{c c} & \begin{array}{ccc} \mathrm{F} & \mathrm{C} & \mathrm{R} \end{array} \\ \begin{array}{c} \mathrm{F} \\ \mathrm{C} \\ \mathrm{R} \end{array} & \begin{pmatrix} 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \end{pmatrix} \end{array}
$$

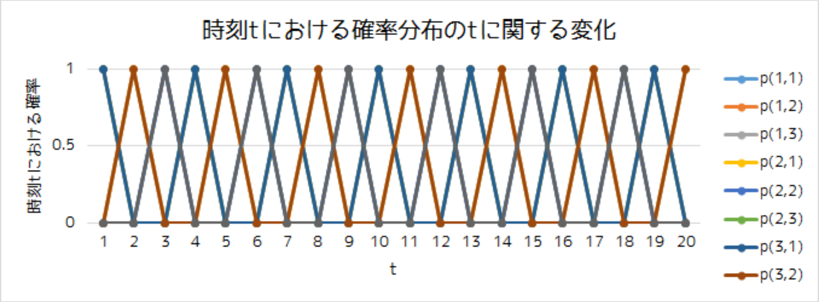
観察

- $\lim_{t\to\infty} \boldsymbol{P}^t$ が存在する ？？？？？
- $\lim_{t\to\infty} \boldsymbol{P}^t$ の行はすべて同じ ？？？？？

収束しない例

$$
\boldsymbol{P} = \begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array}
$$





$\lim \boldsymbol{P}^t$ の行がすべて同じだと何が起こるか (1)

$$\lim_{t\to\infty} \boldsymbol{P}^t = \begin{array}{c} \\ \mathrm{F} \\ \mathrm{C} \\ \mathrm{R} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \mathrm{F} & \mathrm{C} & \mathrm{R} \end{array} \\ \begin{pmatrix} 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \end{pmatrix} \end{array}$$

0 日目が晴れであるとき,
十分時間が経った後の天気は

$$(1,0,0)\begin{pmatrix} 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \end{pmatrix} = (3/8, 3/8, 1/4)$$

$\lim \boldsymbol{P}^t$ の行がすべて同じだと何が起こるか (2)

$$\lim_{t\to\infty} \boldsymbol{P}^t = \begin{array}{c c} & \begin{array}{ccc} \mathrm{F} & \mathrm{C} & \mathrm{R} \end{array} \\ \begin{array}{c} \mathrm{F} \\ \mathrm{C} \\ \mathrm{R} \end{array} & \begin{pmatrix} 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \end{pmatrix} \end{array}$$

0 日目が曇りであるとき,
十分時間が経った後の天気は

$$(0,1,0)\begin{pmatrix} 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \end{pmatrix} = (3/8, 3/8, 1/4)$$

$\lim \boldsymbol{P}^t$ の行がすべて同じだと何が起こるか (3)

$$\lim_{t\to\infty} \boldsymbol{P}^t = \begin{array}{c c} & \begin{array}{ccc} \mathrm{F} & \mathrm{C} & \mathrm{R} \end{array} \\ \begin{array}{c} \mathrm{F} \\ \mathrm{C} \\ \mathrm{R} \end{array} & \begin{pmatrix} 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \end{pmatrix} \end{array}$$

0 日目が雨であるとき,
十分時間が経った後の天気は

$$(0,0,1)\begin{pmatrix} 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \end{pmatrix} = (3/8, 3/8, 1/4)$$

$\lim \boldsymbol{P}^t$ の行がすべて同じだと何が起こるか (3)

$$\lim_{t\to\infty} \boldsymbol{P}^t = \begin{array}{c} \\ \mathrm{F} \\ \mathrm{C} \\ \mathrm{R} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \mathrm{F} & \mathrm{C} & \mathrm{R} \end{array} \\ \begin{pmatrix} 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \end{pmatrix} \end{array}$$

0 日目が晴れ，曇り，雨である確率がどれも $1/3$ のとき，
十分時間が経った後の天気は

$$(1/3, 1/3, 1/3) \begin{pmatrix} 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \\ 3/8 & 3/8 & 1/4 \end{pmatrix} = (3/8, 3/8, 1/4)$$

つまり

- どの初期状態 (確率分布) から始めても，同じ確率分布に収束する
- 収束先の確率分布は，$\lim \boldsymbol{P}^t$ の行に等しい

目次

マルコフ連鎖の定常分布

推移行列 $\boldsymbol{P}$ を持つマルコフ連鎖を考える

定義：定常分布とは？

確率分布 $\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \pi_2, \ldots, \pi_n) \in \mathbb{R}^n$ が $\boldsymbol{P}$ で定められるマルコフ連鎖の **定常分布** であるとは，次を満たすこと

$$\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\pi}$$

- 行列を使わずに書くと，任意の $j \in \mathcal{S}$ に対して

$$\sum_{i \in \mathcal{S}} \pi_i p_{ij} = \pi_j$$

- (線形代数のことばを使えば)，
  1 は $\boldsymbol{P}$ の右固有値で，
  それに対する $\boldsymbol{P}$ の右固有ベクトル (を規格化したものが) $\boldsymbol{\pi}$

マルコフ連鎖の定常分布 — 解釈

推移行列 $\boldsymbol{P}$ を持つマルコフ連鎖を考える

定常分布とは？

確率分布 $\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \pi_2, \ldots, \pi_n) \in \mathbb{R}^n$ が $\boldsymbol{P}$ で定められるマルコフ連鎖の **定常分布** であるとは，次を満たすこと

$$\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\pi}$$

- 行列を使わずに書くと，任意の $j \in \mathcal{S}$ に対して

$$\sum_{i\in\mathcal{S}} \pi_i p_{ij} = \pi_j$$

- $\pi_i = \Pr(X_0 = i)$ とすると，上の式の意味は

$$\Pr(X_0 = j) = \sum_{i\in\mathcal{S}} \Pr(X_0 = i)\Pr(X_1 = j \mid X_0 = i) = \Pr(X_1 = j)$$

$\therefore \Pr(X_0 = j) = \Pr(X_1 = j) = \cdots$ となる (その意味で「定常」)

マルコフ連鎖の定常分布とマルコフ連鎖の時間発展

推移行列 $\boldsymbol{P}$ を持つマルコフ連鎖を考える

命題 (証明は準備が必要なので省略)

ある自然数 m が存在して $\boldsymbol{P}^m$ の成分がすべて正となるとき，次が成立

1. 定常分布 $\boldsymbol{\pi}$ は一意に存在する (ただ 1 つだけ存在する)
2. 極限 $\lim_{t\to\infty} \boldsymbol{P}^t$ が存在し，その各行は $\boldsymbol{\pi}$ に等しい

証明のためのキーワード：ペロン・フロベニウスの定理

帰結

上の仮定が満たされるとき，
どの初期状態 (確率分布) から始めても，(一意な) 定常分布に収束する

定常分布：例 (1)

例 (1)

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/3 & 1/6 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{pmatrix}$$

このとき，$\boldsymbol{\pi} = (3/8, 3/8, 1/4)$ とすると，

$$\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{P} = (3/8, 3/8, 1/4) \begin{pmatrix} 1/2 & 1/3 & 1/6 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{pmatrix} = (3/8, 3/8, 1/4) = \boldsymbol{\pi}$$

- $\therefore$ $\boldsymbol{\pi}$ はこのマルコフ連鎖の定常分布
- $\boldsymbol{P}$ の各成分は正なので，$\lim \boldsymbol{P}^t$ は存在して，その各行は $\boldsymbol{\pi}$ に等しい

定常分布：例 (1) — 計算例

どのようにして，$\boldsymbol{\pi} = (3/8, 3/8, 1/4)$ を見つけたか？

- $\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \pi_2, \pi_3)$ とする
- 次の方程式を解く
  - (1) $\frac{1}{2}\pi_1 + \frac{1}{3}\pi_2 + \frac{1}{4}\pi_3 = \pi_1$
  - (2) $\frac{1}{3}\pi_1 + \frac{1}{3}\pi_2 + \frac{1}{2}\pi_3 = \pi_2$
  - (3) $\frac{1}{6}\pi_1 + \frac{1}{3}\pi_2 + \frac{1}{4}\pi_3 = \pi_3$
  - (4) $\pi_1 + \pi_2 + \pi_3 = 1$
- (1), (2), (3) を書き直す
  - (5) $-6\pi_1 + 4\pi_2 + 3\pi_3 = 0$
  - (6) $2\pi_1 - 4\pi_2 + 3\pi_3 = 0$
  - (7) $2\pi_1 + 4\pi_2 - 9\pi_3 = 0$
- (5)+(6), (7)−(6) から次を得る
  - (8) $-4\pi_1 + 6\pi_3 = 0$, すなわち，$\pi_1 = \frac{3}{2}\pi_3$
  - (9) $8\pi_2 - 12\pi_3 = 0$, すなわち，$\pi_2 = \frac{3}{2}\pi_3$
- この 2 つを (4) に代入して次を得る
  - (10) $\frac{3}{2}\pi_3 + \frac{3}{2}\pi_3 + \pi_3 = 1$, すなわち，$\pi_3 = \frac{1}{4}$
- したがって，$\pi_1 = \pi_2 = \frac{3}{8}$ □

定常分布：例 (2)

例 (2)

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

このとき，$\boldsymbol{\pi} = (1/3, 1/3, 1/3)$ とすると，

$$\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{P} = (1/3, 1/3, 1/3) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (1/3, 1/3, 1/3) = \boldsymbol{\pi}$$

- $\therefore\ \boldsymbol{\pi}$ はこのマルコフ連鎖の定常分布
- しかし，$\lim \boldsymbol{P}^t$ は存在しない (詳細は次のページ)

定常分布：例 (2) — 続き

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{P} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
\boldsymbol{P}^2 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\
\boldsymbol{P}^3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
\boldsymbol{P}^4 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{P}
\end{aligned}
$$

つまり，$\boldsymbol{P}, \boldsymbol{P}^2, \boldsymbol{P}^3$ はすべて異なり，$\boldsymbol{P}^4 = \boldsymbol{P}$ なので，
$\lim \boldsymbol{P}^t$ は存在しない

定常分布：例 (3)

例 (3)

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

このとき，$\boldsymbol{\pi} = (0, 0, 1)$ とすると，

$$\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{P} = (0, 0, 1) \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = (0, 0, 1) = \boldsymbol{\pi}$$

- $\therefore\ \boldsymbol{\pi}$ はこのマルコフ連鎖の定常分布
- しかし，$\boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P}$ であるため，$\lim \boldsymbol{P}^t = \boldsymbol{P}$ となり，
  $\lim \boldsymbol{P}^t$ が存在することは分かるが，
  $\lim \boldsymbol{P}^t$ のすべての行が $\boldsymbol{\pi}$ と同じになるわけではない

目次

1. マルコフ連鎖：例
2. マルコフ連鎖：定義と表現
3. チャップマン・コルモゴロフ方程式
4. マルコフ連鎖の定常分布
5. 今日のまとめ

今日のまとめ

今日の目標

マルコフ連鎖について以下ができるようになる

- 推移行列と状態遷移図を用いてマルコフ連鎖が表現できる
- チャップマン・コルモゴロフ方程式を用いて，
  マルコフ連鎖における時間発展を表現できる
- 定常分布をマルコフ連鎖の極限と正しく関連付けられる

この講義で扱うマルコフ連鎖は
「斉次 離散時間 有限状態 マルコフ連鎖」と呼ばれるもの

目次