

マルコフ連鎖の時間発展の数値計算

樋口さぶろお

龍谷大学工学部数理情報学科

計算科学☆実習 B L07(2016-05-23 Mon)

最終更新: Time-stamp: "2016-05-23 Mon 18:41 JST hig"

今日の目標

- マルコフ連鎖の分布の時間発展を計算するプログラムが書ける
- マルコフ連鎖で母期待値が計算できる



<http://hig3.net>

L05-Q3

TA Prob and Sol: マルコフ連鎖の時間発展

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

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

- ① 定常分布をすべて求めよう.
- ② 初期分布 $\vec{p}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ のとき $\vec{p}(t)$ を求めよう.
- ③ 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.

略解

- ① 推移確率行列 M の固有値 λ_1, λ_2 , 固有ベクトル \vec{u}_1, \vec{u}_2 を求めると,

$$\lambda_1 = 1 \geq \lambda_2 = -\frac{1}{6}, \quad \vec{u}_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} s, \vec{u}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} s \quad (s \neq 0).$$

固有値 $\lambda = 1$ の固有ベクトルである確率ベクトルは $\frac{1}{7} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ のみであり, これが唯一の定常分布.

- ② \vec{u}_1 は確率ベクトルとなるように $s = \frac{1}{7}$ ととる. \vec{u}_2 は確率ベクトルでないので適当に $s = 1$ ととる. 他の取り方をして最終的には同じ $\vec{p}(t)$ が求まる.

$$\begin{aligned} \vec{p}(t) &= M^t \vec{p}(0) \\ &= (UDU^{-1})^t \vec{p}(0) = \begin{pmatrix} \vec{u}_1 & \vec{u}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1^t & 0 \\ 0 & \lambda_2^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{u}_1 & \vec{u}_2 \end{pmatrix}^{-1} \vec{p}(0) \end{aligned}$$

$U^{-1}\vec{p}(0)$ さえ計算すればいいわけだが, これを $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ とおいてあとで決める方が楽.

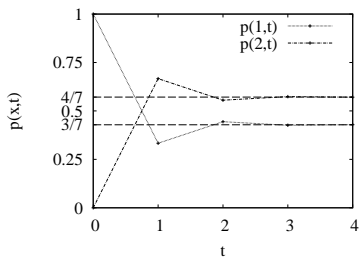
$$\begin{aligned}\vec{p}(t) &= \begin{pmatrix} \vec{u}_1 \lambda_1^t & \vec{u}_2 \lambda_2^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \\ &= a\vec{u}_1 \lambda_1^t + b\vec{u}_2 \lambda_2^t.\end{aligned}$$

これが $\vec{p}(0)$ と等しくなるように, 連立方程式 $\vec{p}(0) = a\vec{u}_1 + b\vec{u}_2$ を解いて a, b を決めると $a = 1, b = \frac{4}{7}$.

$$\vec{p}(t) = \frac{1}{7} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} + \frac{4}{7} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \left(-\frac{1}{6}\right)^t.$$

$t \rightarrow +\infty$ でも $\vec{p}(t)$ が確率ベクトルでありつづけることから, $a = 1$ は計算しなくてもわかる.

時間変化. $|\frac{1}{6}| < 1$ なので, $\vec{p}(t) \rightarrow \frac{1}{7} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} \quad (t \rightarrow +\infty)$



3

$$\vec{p}(t) = \frac{1}{7} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} + \frac{1}{14} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \left(-\frac{1}{6}\right)^t$$

L06-Q2

Quiz 解答:可約なマルコフ連鎖の定常状態

固有値は $\lambda = 1$ (重解) に対応する固有ベクトルは,

$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} s + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} k$ ($s \neq 0$ または $k \neq 0$). 固有値 1 なので, 線形独立な確率ベクトルを 1 組選ぶと便利 (他の選び方でも最終的な結果は変わらない) で, $\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\vec{u}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ とすると, $s\vec{u}_1 + (1-s)\vec{u}_2$ ($0 \leq s \leq 1$) は定常分布.

固有値 $\lambda = \frac{1}{3}$ に対する固有ベクトルは, $\begin{pmatrix} 0 \\ +1 \\ -1 \end{pmatrix} s$ ($s \neq 0$). 確率ベクトルにはなりえないので, 適当に非零ベクトルをひとつ選んで (他の選び方でも最終的な結果は変わらない), $\vec{u}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ +1 \\ -1 \end{pmatrix}$.

$\vec{p}(0)$ が一般の場合の時間発展は

$$\vec{p}(t) = a\vec{u}_1 1^t + b\vec{u}_2 1^t + c\vec{u}_3 \cdot \left(\frac{1}{3}\right)^t.$$

- ① $\vec{p}(0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ から a, b, c を定めて,

$$\vec{p}(t) = \frac{1}{2}\vec{u}_1 + \frac{1}{2}\vec{u}_2 + \frac{1}{4}\vec{u}_3 \cdot \left(\frac{1}{3}\right)^t$$

極限分布 $\vec{p}(\infty) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix}$ は定常分布のひとつ.

- ② $\vec{p}(0) = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ から a, b, c を定めて,

$$\vec{p}(t) = \frac{1}{3}\vec{u}_1 + \frac{2}{3}\vec{u}_2 + 0\vec{u}_3 \cdot \left(\frac{1}{3}\right)^t$$

極限分布 $\vec{p}(\infty) = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix}$ は定常分布のひとつ.

- ③ $\{1\}$ と $\{2, 3\}$ が分かれた推移図. すなわち, 可約なマルコフ連鎖である.

L06-Q3

Quiz 解答:マルコフ連鎖

- ① 推移確率行列 T の固有値 λ , 固有ベクトルを求めると,

$$\lambda = 1, \omega, \omega^2$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} s, \begin{pmatrix} 1 \\ \omega \\ \omega^2 \end{pmatrix} s, \begin{pmatrix} 1 \\ \omega^2 \\ \omega \end{pmatrix} s \quad (s \neq 0)$$

定常分布は $\lambda = 1$ に対する固有ベクトルで, 確率ベクトルになるように s を定めると, $\vec{u}_1 = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

- ② 他の固有値 $\lambda = \omega, \omega^2$ は, $|\omega| = |\omega^2| = 1$ を満たす. よって, 一般には極限分布は存在しない.

極限分布が存在するのは, $\vec{p}(0) = \vec{u}_1 = \vec{p}(t)$ のように最初から定常分布であったときに限られる.

L06-Q4

Quiz 解答:周期的なマルコフ連鎖の定常状態

- ① 固有値 $\lambda = 1$ の固有ベクトルは, $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} s$ ($s \neq 0$).
 確率ベクトルになるように s を選んで, $\vec{u}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ が定常分布.
 なお, 固有値 -1 の固有ベクトルは $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} s$ ($s \neq 0$).
 適当に s を選んで, $\vec{u}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ とおく,
 一般に $\vec{p}(t) = a\vec{u}_1 1^t + b\vec{u}_2 \cdot (-1)^t$.
- ② $\vec{p}(0) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ から a, b を定めると $a = 1, b = 0$ で $\vec{p}(t) = \vec{u}_1$. 極限分布は $\vec{p}(\infty) = \vec{u}_1$ であり定常分布.
- ③ $\vec{p}(0) = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}$ から a, b を定めると $\vec{p}(t) = \vec{u}_1 + \frac{1}{6}\vec{u}_2 \cdot (-1)^t$. 振動するので極限分布は存在しない.

この場合, $x = 1, 2$ は周期的状態である.

ここまで来たよ

3 マルコフ連鎖の時間発展

4 マルコフ連鎖の時間発展の数値計算

- マルコフ連鎖の時間発展の数値計算
- 状態数が大きく規則的なマルコフ連鎖の時間発展の数値計算
- マルコフ連鎖での母期待値の数値計算

マルコフ連鎖の時間発展の数値計算 I

状態 $x = 0, \dots, m-1$ の m 状態のマルコフ連鎖を考える。
Cで次のように書こう。状態番号が1ずれる…

分布 $\vec{p}(t), p(x, t) \rightarrow$

```
double p[m] = {1.0, 0.0, ..., 0.0}; /*配列. mは整数.*/
/* {p(0,t), p(1,t), p(2,t), ... p(m-1,t)} */
```

推移確率行列 $M = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{pmatrix} \rightarrow$

```
double M[][m] = { {0.1, 0.3},
                  {0.9, 0.7} }; /* 2次元配列 */
```

$\{\{p_{11}, p_{12}\}, \{p_{21}, p_{22}\}\}$

行列とベクトルの積

$$\vec{q} = M\vec{p} \rightarrow q_y = \sum_x M_{yx} p_x.$$

時間発展の計算の疑似コード

```

1 p[] を p(x,0) で初期化;
2 p を出力;
3 for (t){
4   pn=M p; /*行列とベクトルの積*/
5   p=pn;
6   p を出力;
7 }

```

ソースコード 1: マルコフ連鎖の時間発展

```

1 /*
2   Markov連鎖の分布の時間発展の計算
3   Time-stamp: "2016-05-23 Mon 06:28 JST hig"
4 */
5 #define _CRT_SECURE_NO_WARNINGS /* Visual C++ に必要なおまじな
6 #include <stdio.h>
7
8 /* 状態数 m */
9 #define NS 3
10
11 int multiply_trans(double *pn, double *p);
12 int print_dist(double *p, int t, int m);
13
14 int main(){
15   int t, tmax;
16   int x;
17   double p[NS];           /* 分布 p(t) */
18   double pn[NS];         /* 分布 p(t+1) */
19   int m=NS;              /* 状態数 */
20
21
22   scanf("%d", &tmax);
23   printf("#T=%d\n", tmax);
24
25   /* 初期分布 */
26   t=0; p[0]=1.0; p[1]=0.0; p[2]=0.0;
27   print_dist(p, t, m); 漸化式で分布を更新ををかけて書き込む遷移確率行列と
   を行に出力

```

ソースコード 2: マルコフ連鎖の時間発展

```
28 連鎖の分布の時間発展の計算に必要なおまじない状態数分布分布状態数初期分布
29
30  for (t=1;t<=tmax;t++){
31     multiply_trans(pn,p);          /* 漸化式で分布を更新 */
32     for (x=0;x<m;x++){
33         p[x]=pn[x];
34     }
35     print_dist(p,t,m);
36 }
37 return 0;
38 }
39
40 /* p に M をかけて q=M p を書き込む. */
41 int multiply_trans(double *q, double *p){
42     int x,y;
43     int m=NS;
44     /* 遷移確率行列 */
45     double M[][NS]={{0.5, 0.5, 0.0},
46                     {0.5, 0.5, 0.0},
47                     {0.0, 0.0, 1.0}};
48     for (y=0;y<m;y++){
49         q[y]=0;
50         for (x=0;x<m;x++){
51             q[y]+=M[y][x]*p[x];
52         }
53     }
54     return 1;
55 }
56
57 /* t と p を 1 行に出力 */
58 int print_dist(double *p, int t, int m){
59     int x;
60     printf("%d,",t);
61     for (x=0;x<m;x++){
62         printf("%f, ",p[x]);
63     }
64     printf("\n");
65     return 0;
66 }
```

ここまで来たよ

3 マルコフ連鎖の時間発展

4 マルコフ連鎖の時間発展の数値計算

- マルコフ連鎖の時間発展の数値計算
- 状態数が大きく規則的なマルコフ連鎖の時間発展の数値計算
- マルコフ連鎖での母期待値の数値計算

L07-Q1

Quiz(ランダムウォークの時間発展)

次の推移確率行列を持つ, 状態空間 $\{x\} = \{0, 1, 2, \dots, 99\}$ 上のマルコフ連鎖を考えよう.

$$M = \begin{pmatrix} \frac{7}{10} & \frac{2}{10} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \frac{3}{10} & \frac{5}{10} & \frac{2}{10} & 0 & & \vdots \\ 0 & \frac{3}{10} & \frac{5}{10} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \frac{2}{10} & 0 \\ \vdots & & \ddots & \frac{3}{10} & \frac{5}{10} & \frac{2}{10} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{3}{10} & \frac{8}{10} \end{pmatrix}.$$

```
double p[100], q[100];
```

で表される \vec{p}, \vec{q} に対して, 入力 \vec{p} を受け取り $\vec{q} = M\vec{p}$ を計算する関数

```
int multiply_trans(double q[], double p[]);
```

を書こう. 行列 M を 2次元配列で表現せず, M の規則性を利用して書くこと.

これ長さ 100 の区間のランダムウォーク

数学的には長さ ∞ の区間のランダムウォークも考えられる \rightarrow 無限状態
マルコフ連鎖

計算機上ではとりあえず有限状態にしないとやってられない。ウォーカーが端から外に出ようとしたらどうする? **境界条件** (一般用語) **壁** (ランダムウォーク用語)

- **吸収壁** 0 に到達したウォーカーはそれ以降動かない
- **反射壁** 0 に到達したウォーカーは -1 には行かないけど, $+1$ に戻ることはある
- **周期境界条件** 0 から -1 に行こうとしたら $m - 1 = 99$ に飛ぶ **ワープ壁**

上の例はどれ? 他の壁に改造すると?

ここまで来たよ

3 マルコフ連鎖の時間発展

4 マルコフ連鎖の時間発展の数値計算

- マルコフ連鎖の時間発展の数値計算
- 状態数が大きく規則的なマルコフ連鎖の時間発展の数値計算
- マルコフ連鎖での母期待値の数値計算

マルコフ連鎖での母期待値の数値計算

定義 $p(x, t) = P(X(t) = x)$ から,

マルコフ連鎖での母期待値

$$\begin{aligned} E[\phi(X(t))] &= \sum_x \phi(x) f(x) \\ &= \sum_{x=1}^m \phi(x) P(X(t) = x) \\ &= \sum_{x=1}^m \phi(x) p(x, t) \end{aligned}$$

L07-Q2

Quiz(マルコフ連鎖の母期待値の時間発展)

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

$$M = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \\ \frac{5}{6} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}.$$

初期分布を $\vec{p}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ とする

- 1 母期待値 $E[(X(t))^2]$ を求めよう.
- 2 定常分布を $\vec{p}(\infty)$ とするとき, $\log |\vec{p}(t) - \vec{p}(\infty)|$ を求めよう. この関数が初期条件によってどう変化するか考えよう.

お知らせ

- 月昼 樋口オフィスアワー (1-502)
- チューター/Math ラウンジ 月火水木昼 1-614
- プチテスト 2016-05-30 月 4
 - ▶ 確率統計及び演習 I の外部記憶ペーパーをまとめて使えば?
<https://register.math.ryukoku.ac.jp/archive/>
- 統計検定 勉強会 今回は受験しない人も歓迎 2016-05-26 木
<http://www.math.ryukoku.ac.jp/toukei-kentei/>



<https://manaba.ryukoku.ac.jp>
マイページの下の方に manaba 出席カード
提出