マルコフ連鎖の時間発展と数値計算

樋口さぶろお

龍谷大学理工学部数理情報学科

計算科学☆実習 B L06(2017-05-22 Mon)

最終更新: Time-stamp: "2017-05-22 Mon 18:14 JST hig"

今日の目標

- マルコフ連鎖の分布の極限分布の存在の有無, 収束の様子を説明できる
- マルコフ連鎖の状態に関する, 母期待値, 母比率を計算できる

http://hig3.net

L05-Q1

Quiz 解答:マルコフ連鎖の推移確率行列

$$\begin{pmatrix} \frac{5}{7} & \frac{1}{7} & 0 & 0 \\ \frac{2}{7} & \frac{4}{7} & \frac{1}{7} & 0 \\ 0 & \frac{2}{7} & \frac{4}{7} & \frac{1}{7} \\ 0 & 0 & \frac{2}{7} & \frac{6}{7} \end{pmatrix}$$

L05-Q2

Quiz 解答:マルコフ連鎖の推移確率行列

$$\begin{pmatrix} \frac{4}{7} & \frac{1}{7} & 0 & \frac{2}{7} \\ \frac{2}{7} & \frac{4}{7} & \frac{1}{7} & 0 \\ 0 & \frac{2}{7} & \frac{4}{7} & \frac{1}{7} \\ \frac{1}{7} & 0 & \frac{2}{7} & \frac{4}{7} \end{pmatrix}$$

L05-Q3

1. 転置推移確率行列 M の固有値 $\lambda_1 = 1$ の固有ベクトル $\vec{u}_1$ を (あるなら) 求めればよい. $M\vec{u}_1 = \vec{u}_1$ を解いて, $\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} s \quad (s \neq 0)$. 定常分布は, 規格化された $\vec{u}_1 = \frac{1}{7}\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$.
2. $\vec{p}(1) = M\vec{p}(0) = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$.

ここまで来たよ

分布の時間発展 I

L06-Q1

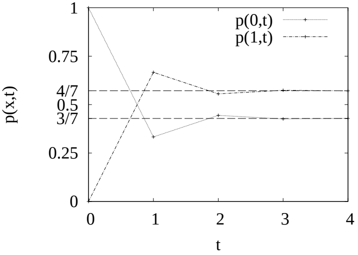
Quiz(マルコフ連鎖の時間発展)

状態空間 $\{0,1\}$ 上のマルコフ連鎖を考える．転置推移確率行列は

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

1. 定常分布をすべて求めよう．
2. 初期分布 $\vec{p}(0) = \left(\begin{smallmatrix} 1 \\ 0 \end{smallmatrix}\right)$ のとき $\vec{p}(1)$ を求めよう．
3. この初期分布のとき $\vec{p}(t)$ を求めよう．
4. 初期分布 $\vec{p}(0) = \frac{1}{2}\left(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \end{smallmatrix}\right)$ のとき $\vec{p}(t)$ を求めよう．

$t \to +\infty$ のとき $\boxed{}$


p(0,t)
p(1,t)
p(x,t)
1
0.75
4/7
0.5
3/7
0.25
0
0
1
2
3
4
t

L06-Q2

Quiz(マルコフ連鎖の定常分布)

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

$$M = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{2}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

なお, M の固有値固有ベクトルは $\lambda = 1, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$, $\quad \vec{u} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}$ であることを使ってよい.

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

いちばん簡単な場合のマルコフ連鎖の時間発展 I

状態空間 $S = \{0, 2, \ldots, m-1\}$ 上のマルコフ連鎖.
転置推移確率行列 M の固有値 $\lambda_i, \vec{u}_i$ $(i = 1, \ldots, m)$. 大きさの順でならべて次のようだとする.

$$1 = \lambda_1 > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_m| \geq 0.$$

$$\text{解} \vec{p}(t) = \vec{u}_1 + a_2 \vec{u}_2 \lambda_2^t + a_3 + \vec{u}_3 \lambda_3^t + \cdots .$$

極限分布 $\vec{p}(+\infty) = \lim_{t \to +\infty} \vec{p}(t) = \vec{u}_1.$

初期分布 $\vec{p}(0)$ によらず,
極限分布は必ず定常分布.

- 第 1 固有値は 1. m が有限のとき, 転置推移確率行列の固有値には, いつでも 1 が含まれる.

いちばん簡単な場合のマルコフ連鎖の時間発展 II

- 第 1 固有ベクトルは $\vec{u}_1$ は確率ベクトルにとれる. $\boxed{}$.
- 第 2 以降の固有値の絶対値が 1 より小 ってことは ってことは $\boxed{}$ 第 2 固有値の絶対値が小さいほど, 極限分布に速く収束する
- 第 2 以降の固有ベクトルは $\boxed{}$

マルコフ連鎖での母期待値

定義 $p(x,t) = P(X(t) = x)$ から,

$$\begin{aligned}\mathrm{E}[\phi(X(t))] =& \sum_x \phi(x) f(x) = \sum_{x=0}^{m-1} \phi(x) p(x,t) \\ =& \sum_{x=0}^{m-1} \phi(x) (M^t \vec{p}(0))_x \\ =& (\phi(0)\phi(1)\cdots\phi(m-1)) M^t \vec{p}(0)\end{aligned}$$

母比率もこののりで.
数値計算も $\vec{p}(t)$ を求めた後でこれを計算すればいい.

L06-Q3

Quiz(マルコフ連鎖の母期待値の時間発展)

次の転置推移確率行列を持つ, 状態空間 $S=\{x\}=\{0,1\}$ 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 $\mathrm{E}[(X(t)+1)^2]$ を求めよう.
2. 条件 $X(t)>0$ が成立する母比率を求めよう.

ここまで来たよ

可約な場合は簡単じゃない I

L06-Q4

Quiz(可約なマルコフ連鎖の定常状態)

次の転置推移確率行列を持つ 状態空間 $S = \{0,1,2\}$ 上のマルコフ連鎖を考える.

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

1. $\vec{p}(0) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ のとき時間発展 $\vec{p}(t)$ を求めよう.
2. $\vec{p}(0) = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ のとき時間発展 $\vec{p}(t)$ を求めよう.
3. 推移図を書こう.

Hint. 固有値 $\lambda = 1$(重解), $\frac{1}{3}$ を使ってよい.

既約 (irreducible) なマルコフ連鎖

どの状態からどの状態へも, 確率 > 0 の矢印をたどって到達できるとき, マルコフ連鎖は (推移確率行列は) 既約であるという. 既約でないとき, 可約であるという. 可約なとき, 複数の定常状態が存在する.

既約でも周期的状態があると簡単でない I

L06-Q5

Quiz(マルコフ連鎖)

状態空間 $S = \{0, 1, 2\}$ 上のマルコフ連鎖を考える．転置推移確率行列 M はを次.

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

1. 定常分布をすべて求めよう.
2. 任意の初期分布は定常分布に近づくか考えよう.
3. 推移図を描こう.

Hint: $\lambda_i = \omega^i (i = 0, 1, 2)$ を使ってよい.

周期的な状態

$k > 1$ 回おきにしか自分に戻ってこない状態．周期的な状態があると，絶対値 1 の固有値が複数ある．このとき，極限分布はないことがある．

L06-Q6

Quiz(周期的なマルコフ連鎖の定常状態)

次の転置推移確率行列をもつ, 状態空間 $S=\{0,1\}$ 上のマルコフ連鎖を考える.

$$M=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

1. 定常分布を求めよう.
2. $\vec{p}(0)=\frac{1}{2}\left(\begin{smallmatrix}1\\1\end{smallmatrix}\right)$ のとき $\vec{p}(t)$ を求めよう. 極限分布はある?
3. $\vec{p}(0)=\frac{1}{3}\left(\begin{smallmatrix}1\\2\end{smallmatrix}\right)$ のとき $\vec{p}(t)$ を求めよう. 極限分布はある?

ここまで来たよ

6 マルコフ連鎖

7 マルコフ連鎖の時間発展と数値計算
- マルコフ連鎖の時間発展
- 一般の場合のマルコフ連鎖の時間発展
- マルコフ連鎖の時間発展の数値計算 (再)

マルコフ連鎖の時間発展の数値計算 I

状態 $x = 0, \ldots, m-1$ の m 状態のマルコフ連鎖を考える.
分布 $\vec{p}(t)$, $p(x,t)$ $\to$

```
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)} */
```

転置推移確率行列 $M = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} \\ p_{10} & p_{11} \end{pmatrix} \to$

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

$\{\{p_{00}, p_{01}\},$
$\{p_{10}, p_{11}\}\}$

行列とベクトルの積

$$\vec{q} = M\vec{p} \to q_x = \sum_y M_{xy} p_y.$$

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

プチテスト (筆記) やります!

2017-06-04 月 4, 10 分 (外部記憶ペーパー作成)+80 分 (筆記), 15 ピーナッツ.
出題計画出題計画は 2016-05-29 火 に確定します．プログラミングや乱数の問題はありますが, Visual Studio や Excel の問題はありません.

- ランダムウォークの座標の初期条件と漸化式, 確率 $p(x,t)$ の初期条件と漸化式, マルコフ連鎖の推移図, マルコフ連鎖の転置推移確率行列と初期条件のどれかが与えられたときどれかを求める (予 L05) $\times n$ 問
- 確率 $p(x,t)$ をいろいろな方法で求める (予 L03, 予 L05, 予 L06) $\times n$ 問
  - 特に, M から $\vec{p}(t)$ を求める問題は必ず出題します.
- ランダムウォークの $\mathrm{E}[X(t)]$ や $\mathrm{V}[X(t)]$ をいろいろな方法で求める (予 L03, 予 L07)
- C の擬似乱数を正しく使う．srand と rand を使ったプログラムの出力の確率を求められる (Quiz)
- マルコフ連鎖の用語を正しく使え, 定常分布, 極限分布を求められる (予 L06)
- 母比率や母期待値を推定する確率シミュレーションのプログラムが書ける (p051,p052)