

確率過程・マルコフ連鎖

樋口さぶろお <https://hig3.net>

龍谷大学大学院 先端理工学部研究科 数理・情報科学コース

計算科学特論 L09(2024-11-20 Wed)

最終更新: Time-stamp: "2024-11-26 Tue 19:27 JST hig"

今日の目標

- 確率過程とマルコフ連鎖を説明できる
- 転置推移確率行列を説明できる



ここまで来たよ

8 一般化線形モデル・一般化線形混合モデルとベイズ化

9 確率過程・マルコフ連鎖

- ランダムウォークの座標の確率分布
- 確率分布 $p(x, t)$ の漸化式
- 確率ベクトル, 転置確率行列

ランダムウォーク

定義

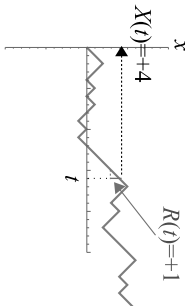
ランダムウォーク $R(t)$: **独立同分布**に従う離散型確率変数. $t = 1, 2, 3, \dots$
 $X(t)$: 次で決まる確率変数.

初期条件 $X(a) = b$ (正確には $P(X(a) = b) = 1$)

漸化式 $X(t) = X(t-1) + R(t)$ ($t = a+1, a+2, a+3, \dots$)

$R(t)$ が ベルヌイ分布 岩薩林 確率・統計 §3.4 $B(1, p)$ にしたがるとき

$$\text{確率 } P(R(t) = r) = \begin{cases} p & (r = 1) \\ q = 1 - p & (r = 0) \\ 0 & (\text{他}) \end{cases}$$

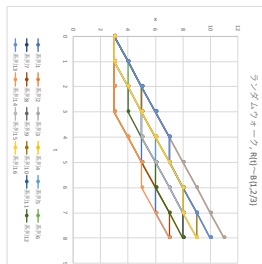
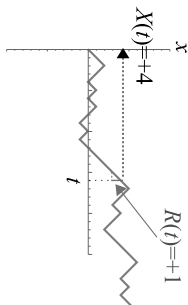


例 $n = 2$

日本語で言うと,

- x 軸上を移動するランダムウォーカーを考える $\rightsquigarrow X(t)$
- ウォーカーは, 時刻 $t = a$ に, $x = b$ から出発する (確率が 1 である)
 $\rightsquigarrow P(X(a) = b) = 1$
- ウォーカーは各時刻に, 確率 $\frac{2}{3}$ で $+1$ だけ移動し, 確率 $\frac{1}{3}$ で移動しない $\rightsquigarrow X(t) = X(t-1) + R(t), R(t) \sim B(1, \frac{2}{3})$

$X(t)$: 時刻 t のランダムウォーカーの座標 (を確率変数とみたもの)
 $(X(0), X(1), X(2), \dots, X(t))$: パス (path) (を確率変数とみたもの)



$t \backslash x$	0	1	2
0			
1			
2			

L09-Q1

Quiz(ランダムウォークの座標の確率分布)

離散ランダムウォークで, $X(0) = 0$, $X(t) = X(t-1) + R(t)$,

$$P(R(t) = r) = \begin{cases} p & (r = 1) \\ 1 - p & (r = 0) \\ 0 & (\text{他}) \end{cases}$$

とする ($0 < p < 1$)

- ① $P(X(2) = x)$ を求めよう ($x = 0, 1, \dots$ は整数).
- ② $E[X(2)]$ を求めよう.
- ③ $V[X(2)]$ を求めよう.
- ④ $P(X(2) > 0)$ を求めよう.

cf. 二項分布 岩薩林 確率・統計 §3.4

$t \backslash x$	0	1	2
0			
1			
2			

$t \backslash x$	0	1	2
0			
1			
2			

ここまで来たよ

8 一般化線形モデル・一般化線形混合モデルとベイズ化

9 確率過程・マルコフ連鎖

- ランダムウォークの座標の確率分布
- 確率分布 $p(x, t)$ の漸化式
- 確率ベクトル, 転置確率行列

確率分布 $p(x, t)$ の定義

定義 (確率分布 $p(x, t)$)

時刻 t に, ウォーカーが x にいる確率 $p(x, t) = P(X(t) = x)$.

t を決めるごとに, 離散型確率分布 $f(x) = p(x, t)$ がある

岩薩林 確率・統計 §3.1

性質 $\forall t \quad \sum_{x=-\infty}^{+\infty} p(x, t) = 1$

$t \backslash x$	0	1	2
0			
1			
2			

$p(x, t)$ の漸化式

具体例で

「ランダムウォーカーが時刻 t に x にいるとき、時刻 $t+1$ には、確率 p で $x+1$ に移動し、確率 $q = 1 - p$ で x にとどまる。

↓

$$X(t) = X(t-1) + R(t)$$

$$P(R(t) = r) = \begin{cases} p & (r = 1) \\ q = 1 - p & (r = 0) \\ 0 & (\text{他}) \end{cases}$$

確率微分方程式的描像, ランジュバン方程式的描像

↓ 確率 (合計 1) だけど, x 軸上に合計 $N = 1000$ 人いるかのように考えよう。

時刻 t に x にいる $N \times p(x, t)$ 人のうち、時刻 t に、平均的には

- x から $x+1$ に去るのは, $N \times p(x, t-1) \times p$ 人
- x から移動せず x にとどまるのは $N \times p(x, t-1) \times q$ 人

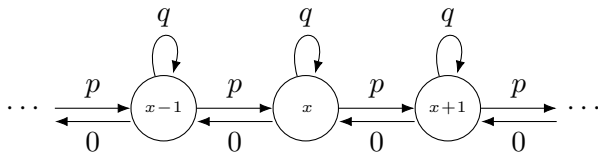
$X(t)$ の漸化式から $p(x, t)$ の漸化式を導きたい
逆に考えると, 時刻 t に,

- $x - 1$ から, x に来るのは, $N \times p(x - 1, t - 1) \times p$ 人
- x から移動せず x にいるのは, $N \times p(x, t - 1) \times q$ 人

この合計が, t に x にいる人すべて $N \times p(x, t)$.

両辺のどこにも, 確率変数はなくなった!(確率はあるけど)

拡散方程式的描像, マスター方程式的描像, フォッカー・プランク方程式的描像



係数は t によらない.

計算で

条件付き確率

$$\begin{aligned}
 P(X(t) = x) &= \sum_y P(X(t) = x | X(t-1) = y) P(X(t-1) = y) \\
 &= \dots + 0 \\
 &\quad + P(X(t) = x | X(t-1) = x-1) P(X(t-1) = x-1) \\
 &\quad + P(X(t) = x | X(t-1) = x) P(X(t-1) = x) + 0 + \dots \\
 &= P(R(t) = 1) P(X(t) = x-1) \\
 &\quad + P(R(t+1) = 0) P(X(t) = x)
 \end{aligned}$$

L09-Q2

Quiz(離散的なランダムウォークの確率の漸化式)

時間 t , 座標 x が整数値のみをとるようなランダムウォークを考える.
時刻 $t = 5$ に $x = 2$ を出発し, 各時刻 t に,

確率 $\frac{1}{7}$ で $+2$ だけ移動,
確率 $\frac{4}{7}$ で -1 だけ移動,
確率 $\frac{2}{7}$ で 0 だけ移動 (移動しない).

時刻 t にランダムウォーカーが座標 x にいる確率 $p(x, t)$ の漸化式と初期条件を求めよう.

(まとめると) ルールの $p(x, t)$ の漸化式への変換

「ランダムウォーカーは時刻 a に b から出発, が時刻 $t-1$ に x にいるとき, 時刻 t には, 確率 p で $x+1$ に, 確率 q で $x-1$ に移動, 確率 $1-p-q$ でその場にとどまる」

↓

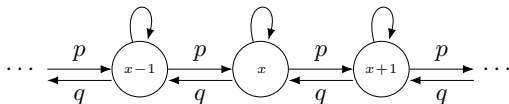
$$P(X(a) = b) = 1,$$

$$X(t) = X(t-1) + R(t), \quad P(R(t) = r) = \begin{cases} q & (r = -1) \\ 1 - p - q & (r = 0) \\ p & (r = 1) \\ 0 & (\text{他}) \end{cases}$$

↓

$$p(x, a) = \begin{cases} 1 & (x = b) \\ 0 & (\text{他}) \end{cases}.$$

$$p(x, t) = p \cdot p(x-1, t-1) + (1-p-q) \cdot p(x, t-1) + q \cdot p(x+1, t-1).$$



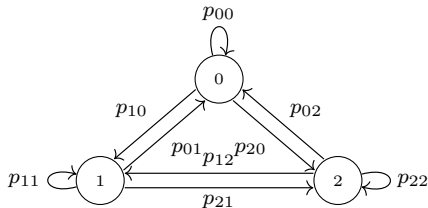
推移図 推移=transition

マルコフ連鎖の例 I

空間の移動でなく,
ウォーカー: 猫 0: 食べる 1: 寝る 2: 遊ぶ
の間の状態遷移と思ってよい.

状態空間 $S = \{0, 1, 2\}$

状態 $x = 0$: 食べる, ...



推移確率

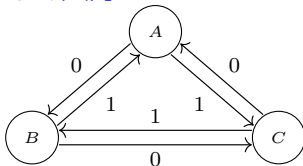
条件付き確率

$$p_{\text{先元}} = p_{xy} = P(X(t) = x | X(t-1) = y)$$

上の量を, 世の中では p_{xy} でなく p_{yx} と書くこともある.

マルコフ連鎖「このような」状態空間と,
推移確率の組.

比較: オートマトンの状態遷移
図では, 矢印の数値は確率で
なく入力



$p(x, t)$ の漸化式

$$p(x, t) = p \cdot p(x-1, t-1) + (1-p-q) \cdot p(x, t-1) + q \cdot p(x+1, t-1)$$

$$p(0, t) = p_{00} \cdot p(0, t-1) + p_{01} \cdot p(1, t-1) + p_{02} \cdot p(2, t-1)$$

$$p(1, t) = p_{10} \cdot p(0, t-1) + p_{11} \cdot p(1, t-1) + p_{12} \cdot p(2, t-1)$$

$$p(2, t) = p_{20} \cdot p(0, t-1) + p_{21} \cdot p(1, t-1) + p_{22} \cdot p(2, t-1)$$

$$\begin{pmatrix} p(0, t) \\ p(1, t) \\ p(2, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} & p_{02} \\ p_{10} & p_{11} & p_{12} \\ p_{20} & p_{21} & p_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(0, t-1) \\ p(1, t-1) \\ p(2, t-1) \end{pmatrix}$$

$$p(x, t) = \sum_{y=0,1,2} p_{xy} \cdot p(y, t-1). \quad (x=0, 1, 2)$$

転置推移確率行列 M , 分布=ベクトル $\vec{p}(t)$ で書くと $(x, y$ が成分番号)

$$\vec{p}(t) = M\vec{p}(t-1).$$

ベクトル $\vec{p}(t)$ は, 横 x , 縦 t の表の横 1 行に相当.

この漸化式を解くと, $\vec{p}(t) = M\vec{p}(t-1) = M^2\vec{p}(t-2) = \cdots = M^t\vec{p}(0).$

L09-Q3

Quiz(マルコフ連鎖の推移確率行列)

$x = 0, 1, 2, 3$ 上のランダムウォークを考える.

時刻 $t = 0$ に $x = 1$ から出発する. 時刻 t に x にいたウォーカーは,

- 確率 $\frac{1}{7}$ で $x - 1$ に移動し
- 確率 $\frac{2}{7}$ で $x + 1$ に移動し
- 確率 $\frac{4}{7}$ で x にとどまる

ただし, 上のルールで, $x = 0$ から $x = -1$ に移動しようとしたら $x = 3$ に行く, $x = 3$ から $x = 4$ に移動しようとしたら $x = 0$ に行くとする.
これをマルコフ連鎖としてとらえたとき,

- 1 推移図を書こう.
- 2 転置推移確率行列を書こう.
- 3 時刻 $t = 0$ における分布 $\vec{p}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ であるとき, $\vec{p}(1)$ を求めよう.

L09-Q4

Quiz(マルコフ連鎖の推移確率行列)

$x = 0, 1, 2, 3$ 上のランダムウォークを考える.

時刻 $t = 0$ に $x = 1$ から出発する. 時刻 t に x にいたウォーカーは,

- 確率 $\frac{1}{7}$ で $x - 1$ に移動し
- 確率 $\frac{2}{7}$ で $x + 1$ に移動し
- 確率 $\frac{4}{7}$ で x にとどまる

ただし, 上のルールで, $x = 0$ から $x = -1$ や, $x = 3$ から $x = 4$ に移動しようとしたときは, 元の x にとどまるものとする.

これをマルコフ連鎖としてとらえたとき,

- 1 推移図を書こう.
- 2 転置推移確率行列を書こう.
- 3 時刻 $t = 0$ における分布 $\vec{p}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ であるとき, $\vec{p}(1)$ を求めよう.

ここまで来たよ

8 一般化線形モデル・一般化線形混合モデルとベイズ化

9 確率過程・マルコフ連鎖

- ランダムウォークの座標の確率分布
- 確率分布 $p(x, t)$ の漸化式
- 確率ベクトル, 転置確率行列

線形代数のりで確率ベクトル, 転置確率行列の言葉を準備!

非負ベクトル

m 次元ベクトル $\begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ \vdots \\ p_{m-1} \end{pmatrix}$ が $p_i \geq 0$ を満たすとき, **非負ベクトル**という.

確率ベクトル

非負ベクトル $\begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ \vdots \\ p_{m-1} \end{pmatrix}$ が, **規格化** $\sum_{i=0}^{m-1} p_i = 1$ を満たすとき, **確率ベクトル**という.

線形代数のりで確率ベクトル, 転置確率行列の言葉を準備 II

離散型確率分布 $f(x)$ は, 確率ベクトルと 1 対 1 に対応.

$$\vec{p} = \begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(0) \\ f(1) \\ f(2) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

非負行列 ($n \times m = 3 \times 2$ の例で)

実行列 $\begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} \\ p_{10} & p_{11} \\ p_{20} & p_{21} \end{pmatrix}$ が $p_{ij} \geq 0$ を満たすとき **非負行列** という.

転置確率行列

行列 $M = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} \\ p_{10} & p_{11} \\ p_{20} & p_{21} \end{pmatrix}$ の各列ベクトルが確率ベクトルであるとき, つまり

$\forall j \sum_{i=0}^{n-1} p_{ij} = 1$ であるとき, M を **転置確率行列** という.

推移確率行列

転置推移確率行列

マルコフ連鎖に現れる, 転置確率行列

$$M = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} & p_{02} \\ p_{10} & p_{11} & p_{12} \\ p_{20} & p_{21} & p_{22} \end{pmatrix}$$

を, マルコフ連鎖の**転置推移確率行列**という. $m \times m$ 正方行列.

漸化式 $\vec{p}(t) = M\vec{p}(t-1)$ の解

$$\vec{p}(t) = M\vec{p}(t-1) = M^2\vec{p}(t-2) = \cdots = M^t\vec{p}(0).$$

転置確率行列と確率ベクトルの積

M が転置確率行列, $\vec{p}$ が確率ベクトルのとき, $M\vec{p}$ も確率ベクトル

証明:

確率過程とマルコフ連鎖

確率過程 時間 t に依存する確率変数

もちろん反復試行から来る独立な確率変数群 $R(t)$ も時間 t に依存するけど, 独立じゃない場合がおもしろい

離散時間マルコフ連鎖は, 次の性質を満たす確率過程.

離散時間 t が離散的. $t = 0, 1, 2, \dots$

マルコフ Markov $\vec{p}(t)$ が直前の時刻の分布 $\vec{p}(t-1)$ だけから決まる. 転置推移確率行列 p_{xy} で表現できる.

連鎖 chain 状態空間 $S \ni x$ が離散的.

いま考えてる, 時間空間離散のランダムウォークや猫は離散時間マルコフ連鎖の典型例.

離散時間マルコフ連鎖の (確率) 分布は, 確率ベクトルで表現できる.

離散時間マルコフ連鎖の遷移確率は, 転置確率行列で表現できる.