Appendix (付録)

◆マルコフ過程入門◆

時刻と共に，確率分布が変化していく確率過程として，“**マルコフ過程**”(***Markov process***)(または，“**マルコフ連鎖**”(***Markov chain***))について，その基本を教えよう。

ここでは，例題を分かりやすくするために，確率分布の経時変化ではなく，**2** つの町 **A** と **B** の人口の経時変化から解説を始めることにしよう。

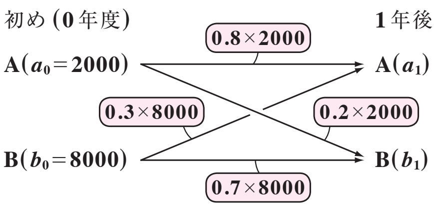
● 2 つの町の人口の変化を調べよう！

2 つの町 **A**，**B** があり，初めの **A** 町の人口を $a_0 = 2000$ 人，**B** 町の人口を $b_0 = 8000$ 人とする。そして，**1** 年後，

(ⅰ) **A** 町に住んでいた人の **0.8**(＝**80**%) は **A** 町に残り，**0.2**(＝**20**%) は **B** 町に移るものとする。また，

(ⅱ) **B** 町に住んでいた人の **0.7**(＝**70**%) は **B** 町に残り，**0.3**(＝**30**%) は **A** 町に移るものとしよう。

図 1　A 町と B 町の人口の変化



ここで，**1** 年後の **A** 町と **B** 町の人口をそれぞれ a_1，b_1 とおく。そして図 **1** の模式図に従って，この a_1 と b_1 を計算すると，次のようになるね。

$$\begin{cases} a_1 = 0.8 \times a_0 + 0.3 \times b_0 & \cdots\cdots ① \\ b_1 = 0.2 \times a_0 + 0.7 \times b_0 & \cdots\cdots ② \end{cases}$$

具体的には，
$a_1 = 0.8 \times 2000 + 0.3 \times 8000 = 4000$
$b_1 = 0.2 \times 2000 + 0.7 \times 8000 = 6000$
となって，人口が変化している。

①，②をベクトルや行列の形で表示すると，

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.8a_0 + 0.3b_0 \\ 0.2a_0 + 0.7b_0 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{bmatrix}}_{\text{推移確率行列 } M} \begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \end{bmatrix} \cdots\cdots ③$$ となる。

ここで，③の **2** 行 **2** 列の行列 $\begin{bmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{bmatrix}$ を M とおこう。この行列 M は，

“**推移確率行列**”(*transition probability matrix*) と呼ばれ，マルコフ過程で重要な役割を演じる行列なんだね。ここで，$M=\begin{bmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{bmatrix}$ について，

(ⅰ) 第 1 列の $\begin{bmatrix} 0.8 \\ 0.2 \end{bmatrix}$ は A町の人口を 1 年後に A 町と B 町に振り分ける確率を表し，$0.8+0.2=1$ (全確率) となる。また，

(ⅱ) 第 2 列の $\begin{bmatrix} 0.3 \\ 0.7 \end{bmatrix}$ は B町の人口を 1 年後に A 町と B 町に振り分ける確率を表し，$0.3+0.7=1$ (全確率) となることも，頭に入れておこう。

そして，マルコフ過程では，この推移確率行列 M の各要素は，時刻に対して不変であるものとする。よって，③で示す 0 年度と 1 年後の関係式を一般化して，n 年後の A 町と B 町の人口 a_n，b_n と $n+1$ 年後の A 町と B 町の人口 a_{n+1}，b_{n+1} の関係式として，次のように表すことができるんだね。

$$\begin{bmatrix} a_{n+1} \\ b_{n+1} \end{bmatrix}=M\begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix} \cdots\cdots(*1) \quad (n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots)$$

よって，これから，n 年後の人口 a_n，b_n は，初めの人口 a_0，b_0 を用いて，次のように表せる。

$$\begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix}=M^n\begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \end{bmatrix} \quad \cdots\cdots(*2) \quad (n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$$

$(*1)$ を
$F(n+1)=M\cdot F(n)$ の
形の漸化式と考えると，
$F(n)=M^n\cdot F(0)$
すなわち，
$\begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix}=M^n\begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \end{bmatrix}$
と変形することができる。

具体的に計算すると，

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix}=M\begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2000 \\ 8000 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 4000 \\ 6000 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix}=M^2\begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \end{bmatrix}=M\begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 4000 \\ 6000 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 5000 \\ 5000 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a_3 \\ b_3 \end{bmatrix}=M^3\begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \end{bmatrix}=M\begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 5000 \\ 5000 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 5500 \\ 4500 \end{bmatrix}$$

………………………………………………………………

となって，1 年毎の A町と B町の人口の変化の様子を調べることができるんだね。では，$n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots$と，この確率過程により，人口の変化が進んで最終的にどうなるのか？興味が湧いてきたでしょう。これから調べてみよう！

● $n \to \infty$ の定常状態を調べよう！

$$\begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix} = M^n \begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \end{bmatrix} \cdots\cdots(*2) \quad (n = 1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$$

$n = 1, 2, 3, \cdots$と，nを大きくしていったとき，2つの町の人口はどうなるのか？ すなわち，$\lim_{n\to\infty} a_n$と$\lim_{n\to\infty} b_n$について調べよう。そのためには，$(*2)$に示すように，まず，推移確率行列Mのn乗，すなわちM^nを求め，この極限$\lim_{n\to\infty} M^n$を調べればいいんだね。

ここではまず，一般論として，2行2列の行列Aについて，A^nの求め方を下に示しておこう。

$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ の A^n の求め方

・ケーリー・ハミルトンの定理より，$A^2 - (a+d)A + (ad-bc)\underbrace{E}_{\text{単位行列}} = \underbrace{O}_{\text{零行列}} \cdots\cdots$㋐

・㋐より，この特性方程式 $x^2 - (a+d)x + ad - bc = 0 \cdots\cdots$㋑ を作り，この解を$\lambda_1$，$\lambda_2$とする。すなわち，㋑は，

$x^2 - (a+d)x + ad - bc = (x - \lambda_1)(x - \lambda_2) = 0 \cdots\cdots$㋑′ となる。

・次に，x^nを$x^2 - (a+d)x + ad - bc$で割って，余りを$px + q$とおく。

すなわち，$x^n = \{x^2 - (a+d)x + ad - bc\}\underbrace{Q(x)}_{\text{商}} + \underbrace{px + q}_{\text{余り}} \cdots\cdots$㋒

とおくと，$x^n = (x - \lambda_1)(x - \lambda_2)Q(x) + px + q \cdots\cdots$㋒′ となる。

㋒′はxの恒等式より，㋒′のxに，$x = \lambda_1$とλ_2を代入して，

$$\begin{cases} \lambda_1{}^n = \cancel{\underbrace{(\lambda_1 - \lambda_1)}_{0}(\lambda_1 - \lambda_2)Q(\lambda_1)} + p\lambda_1 + q = p\lambda_1 + q \cdots\cdots㋓ \\ \lambda_2{}^n = \cancel{(\lambda_2 - \lambda_1)\underbrace{(\lambda_2 - \lambda_2)}_{0}Q(\lambda_2)} + p\lambda_2 + q = p\lambda_2 + q \cdots\cdots㋔ \end{cases}$$

となる。

㋓，㋔より，pとqの値を求める。

・A^nを$A^2 - (a+d)A + (ad-bc)E$で割ると，㋒と同様に，

$A^n = \cancel{\underbrace{\{A^2 - (a+d)A + (ad-bc)E\}}_{O\,(㋐より)}Q(A)} + pA + qE \cdots\cdots$㋕

が導ける。そして，㋐より㋕は，

$A^n = pA + qE$ となる。これに㋓，㋔から求めたp，qの値を代入すればA^nが求まるんだね。この一連の流れを覚えておこう！

それでは，$M=\begin{bmatrix}0.8 & 0.3\\0.2 & 0.7\end{bmatrix}$ について，M^n を求めて，$\lim_{n\to\infty}M^n$ を求めてみよう。

ケーリー・ハミルトンの定理より，

$M^2-1.5M+0.5E=O$ ……④ ← $M^2-(0.8+0.7)M+(0.8\times0.7-0.3\times0.2)E=O$

よって，特性方程式 $x^2-1.5x+0.5=0$ より，

$(x-1)(x-0.5)=0$　　$\therefore x=1$ または 0.5

次に，x^n を $x^2-1.5x+0.5(=(x-1)(x-0.5))$ で割って，

$x^n=\underbrace{(x-1)(x-0.5)}_{(x^2-1.5x+0.5)}\cdot\underbrace{Q(x)}_{商}+\underbrace{px+q}_{余り}$ ……⑤　とおく。

⑤は x の恒等式より，⑤の両辺に $x=1$ と 0.5 を代入して，

$\begin{cases}p+q=1 & \cdots\cdots⑥\\0.5p+q=(0.5)^n & \cdots\cdots⑦\end{cases}$ ← $1^n=1\cdot p+q$，$(0.5)^n=0.5\cdot p+q$

⑥－⑦より，$0.5p=1-(0.5)^n$　　$\therefore p=2-2\cdot(0.5)^n$ ……⑧

⑥より，$q=1-p=1-2+2\cdot(0.5)^n=-1+2\cdot(0.5)^n$ ……⑨

ここで，M^n を $M^2-1.5M+0.5E$ で割ると，⑤と同様に，

$M^n=\underbrace{\cancel{(M^2-1.5M+0.5E)\cdot Q(M)}}_{O(④より)}+pM+qE=pM+qE$　が導ける。

よって，$M^n=\{\underbrace{2-2\cdot(0.5)^n}_{p}\}M+\{\underbrace{-1+2\cdot(0.5)^n}_{q}\}E$ ……⑩　（⑧，⑨より）

ここで，$n\to\infty$ の極限を調べると，

$$\lim_{n\to\infty}M^n=\lim_{n\to\infty}[\{2-\cancel{2\cdot\underbrace{(0.5)^n}_{0}}\}M+\{-1+\cancel{2\cdot\underbrace{(0.5)^n}_{0}}\}E]$$

$$=2M-E=2\begin{bmatrix}0.8 & 0.3\\0.2 & 0.7\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}1.6-1 & 0.6\\0.4 & 1.4-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.6 & 0.6\\0.4 & 0.4\end{bmatrix}$$ ……⑪　となる。

以上より，$(*2)$ の両辺の $n\to\infty$ の極限をとって，$\lim_{n\to\infty}a_n$，$\lim_{n\to\infty}b_n$ を求めよう。

$$\lim_{n\to\infty}\begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix} = \lim_{n\to\infty} \underbrace{M^n}_{\begin{bmatrix} 0.6 & 0.6 \\ 0.4 & 0.4 \end{bmatrix}\ (⑪より)} \begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.6 & 0.6 \\ 0.4 & 0.4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2000 \\ 8000 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a_{n+1} \\ b_{n+1} \end{bmatrix} = M\begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix} \cdots\cdots(*1)$$
$$\begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix} = M^n\begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \end{bmatrix} \cdots\cdots(*2)$$
$(n = 1, 2, 3, \cdots)$

$$= \begin{bmatrix} 0.6\times2000+0.6\times8000 \\ 0.4\times2000+0.4\times8000 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6000 \\ 4000 \end{bmatrix}$$

よって，$n\to\infty$とすると，A町の人口は，$\lim_{n\to\infty} a_n = 6000$(人)に，またはB町の人口は，$\lim_{n\to\infty} b_n = 4000$(人)に落ち着くことになる。これを人口が変化しなくなった状態，すなわち“**定常状態**”というんだね。

実際にnが十分に大きくなって，$a_n = 6000$，$b_n = 4000$になったとして，これを$(*1)$に代入して，翌年のA町とB町の人口a_{n+1}とb_{n+1}を求めてみると，

$$\begin{bmatrix} a_{n+1} \\ b_{n+1} \end{bmatrix} = M\begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 6000 \\ 4000 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0.8\times6000+0.3\times4000 \\ 0.2\times6000+0.7\times4000 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6000 \\ 4000 \end{bmatrix}$$ となる。つまり，

$a_{n+1} = 6000$，$b_{n+1} = 4000$となって，変化しないことが分かるでしょう？

逆に，$\lim_{n\to\infty} a_n$と$\lim_{n\to\infty} b_n$が共に極限値$\lim_{n\to\infty} a_n = \alpha$と$\lim_{n\to\infty} b_n = \beta$をもつものと仮定すると，$M^n$や$\lim_{n\to\infty} M^n$を求めなくても，$(*1)$から$\alpha$と$\beta$の値を求めることもできる。このとき，$\lim_{n\to\infty} a_n = \lim_{n\to\infty} a_{n+1} = \alpha$，$\lim_{n\to\infty} b_n = \lim_{n\to\infty} b_{n+1} = \beta$となるので，$n\to\infty$のとき，

$$\begin{bmatrix} a_{n+1} \\ b_{n+1} \end{bmatrix} = M\begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix} \cdots\cdots(*1)$$ は，$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = M\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \cdots\cdots⑫$$ と変形できる。

⑫より，

$$M\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} - E\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \underbrace{(M-E)}_{\begin{bmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.2 & 0.3 \\ 0.2 & -0.3 \end{bmatrix}}\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

よって，$$\begin{bmatrix} -0.2 & 0.3 \\ 0.2 & -0.3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.2\alpha+0.3\beta \\ 0.2\alpha-0.3\beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$ より，

$-0.2\alpha+0.3\beta=0 \quad \beta=\dfrac{2}{3}\alpha$ ……⑬ となる。

もう1つの式 $0.2\alpha-0.3\beta=0$ も，これと同じ式だね。

ここで，$\alpha+\beta=10000$ より，$\alpha+\dfrac{2}{3}\alpha=10000$（⑬より） $\dfrac{5}{3}\alpha=10000$

A町とB町の元の人口の和 $2000+8000$ は，変化せずに一定であるとしている。

$\therefore \alpha=10000\times\dfrac{3}{5}=6000$ さらに，$\beta=10000-\alpha=4000$ も導けるんだね。
納得いった？

● 確率分布の変化がマルコフ過程だ！

以上で，最も簡単なマルコフ過程の解説はほぼ終わったんだけれど，本当のことを言うと，マルコフ過程とは，人口のような具体的な人数の分布の変化を表すのではなくて，確率分布の変化を表すものなんだね。

したがって，今回A町とB町の初めの人口をそれぞれ $a_0=2000$(人)，$b_0=8000$(人)とおいたけれど，これを人口の割合と見て，$a_0=0.2$，$b_0=0.8$ という確率分布に置き換えれば，これまでの解説はそのまま活かされて，$\lim_{n\to\infty} a_n=6000$，$\lim_{n\to\infty} b_n=4000$ の代わりに，$\lim_{n\to\infty} a_n=0.6$，$\lim_{n\to\infty} b_n=0.4$ となるんだね。

従って，初めの確率分布 $\begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0.2 \\ 0.8 \end{bmatrix}$ が，推移確率行列 $M=\begin{bmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{bmatrix}$ によるマルコフ過程により，$n=1, 2, 3, \cdots$ と変化していき，$n\to\infty$ の極限においては，$\lim_{n\to\infty}\begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.4 \end{bmatrix}$ になるということなんだね。この変化の様子を図2に示しておこう。これでマルコフ過程の基本もご理解頂けたと思う。

図2　確率分布のマルコフ過程（または，マルコフ連鎖）

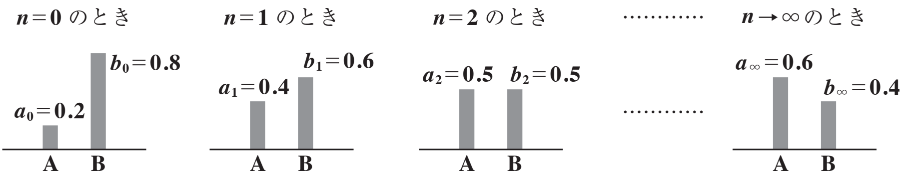


図2のAとBには，0と1などの確率変数 $X=0$，1 を対応させればいい。