確率数理工学12

再帰性と到達時刻

Def（平均到達時間と平均再帰時間）

$m(i,j)$ = 状態 i から j への平均到達時間

$$
m(i,j) \overset{\text{def}}{=} \begin{cases} \displaystyle\sum_{k=1}^{\infty} k\, P(T_j = k \mid X_0 = i) = E[T_j \mid X_0 = i] & (\text{if } \underbrace{P(T_j < \infty \mid X_0 = i)}_{= f(i,j)} = 1) \\ \infty & (\text{otherwise}) \end{cases}
$$

$(T_j = \inf\{n \geq 1 \mid X_n = j\})$

$m(i,i)$ を平均再帰時間と呼ぶ

同じ

Def（正再帰性）

i: 再帰的なとき.

$$
\begin{cases} i \text{ が正再帰的} \overset{\text{def}}{\iff} m(i,i) < \infty \\ i \text{ が零再帰的} \iff m(i,i) = \infty \end{cases}
$$

（非再帰的なら自動的に $m(i,i) = \infty$ である）

- 再帰的：再帰時間が a.s. で有限
  - 正再帰的：再帰時間の期待値が有限
  - 零再帰的：　〃　が無限
- 非再帰的：再帰時間が無限になりうる

平均到達時間の計算法

次の時刻にkへ到達　その後にjへ到達

$$m(i,j) = p(i,j)\times 1 + \sum_{k\neq j} p(i,k)\{1 + m(k,j)\}$$

$p(i,j)\times 1$：iからjへ1stepで到達

$m(k,j)$：iからkに行ってから jに到達するのに必要なstep数

$$\Rightarrow \boxed{m(i,j) = 1 + \sum_{k\neq j} p(i,k)\, m(k,j)}$$

$$\left(\because\ p(i,j) + \sum_{k\neq j} p(i,k) = \sum_{k\in I} p(i,k) = 1\right)$$

この方程式を各jごとに解く。
$i=j$とすれば平均再帰時間も求まる。
解が一意でなければ最小の非負解$(m(i,j))$がそれになる。

※（証明は与えないが、補足資料の吸収確率の計算と同様に示せる。）

Def（吸収確率）

i：非再帰的な状態
j：再帰的な状態 ←（分解定理より、ある再帰的な既約成分に含まれる）

iからjへの吸収確率 $\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ iからjを含む再帰的な同値類への到達確率

Prop　jが再帰的かつ $j \to j'$ なら $f(j,j')=1$ である。

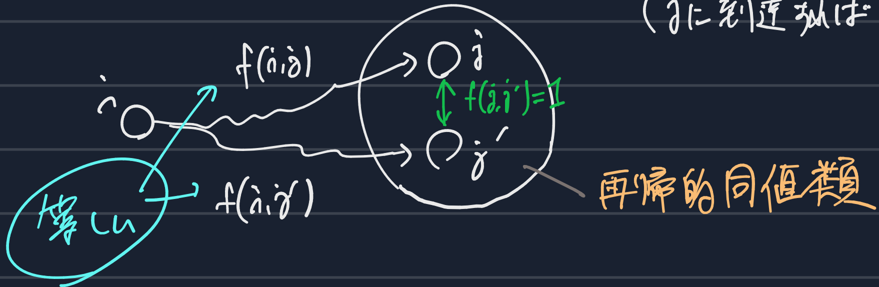
Proof

前回の講義資料より、$f(j,j)=1$ でjが再帰的になることは示せている。
よって、$j' \to j$ かつ、j'は再帰的なので、再び同じ議論により、$f(j',j)=1$ でもある //

$\Rightarrow$ このことから、$\forall j' \in C(j)$ で、$f(i,j) = f(i,j')$ がわかる。

（jに到達すれば必ずj'にも到達するし、逆もしかり）

↳次ページに証明



(参考) $^\forall k \in C(j)$ について、$f(i,k) = f(i,j)$ になることの証明

$$f(i,k) = P(T_k<\infty \mid X_0=i) \geq \underbrace{P(T_j \leq T_k < \infty \mid T_j<\infty)P(T_j<\infty \mid X_0=i)}_{\text{jを通ってからkに到達するprob.}}$$

$$= \underbrace{P(T_k<\infty \mid X_0=j)}_{f(j,k)=1} P(T_j<\infty \mid X_0=i) = f(i,j)$$

kとjを逆にすれば、$f(i,k) \leq f(j,k)$も得るので、$f(i,k) = f(i,j)$ //

吸収確率の計算方法

$C(j)$: jを含む再帰的な同値類 (閉かつ既約)

T: 非再帰的な元の集合

$$f(i,j) = p(i,j) + \sum_{\substack{k\in C(j)\\(k\neq j)}} p(i,k)f(k,j) + \sum_{k\in T} p(i,k)f(k,j) + \sum_{k\in I-C(j)-T} p(i,k)f(k,j)$$

ここで
$$\begin{cases} k \in C(j) & \Rightarrow f(k,j) = 1 \\ k \in I - C(j) - T & \Rightarrow f(k,j) = 0 \end{cases} \quad \text{(分解定理)}$$

なので、

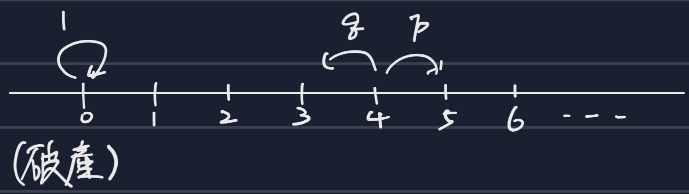
$$\boxed{f(i,j) = \sum_{k\in C(j)} p(i,k) + \sum_{k\in T} p(i,k)f(k,j)}$$

$\Rightarrow$ この方程式を解けば良い。

($^\forall j' \in C(j)$ について $f(i,j') = f(i,j)$ とすれば良い)

解が一意でない場合は最小の非負解がそれになる。

Ex. ギャンブラーの破産確率



確率 p で $+1$ 万円
〃 q で -1 万円
所持金 0 で破産

資産 i から始めて破産する確率を求める

$a(0)=1$, $a(i)$: i から始めて破産する確率 $(=f(i,0))$

方程式： $a(i) = p\,a(i+1) + q\,a(i-1) \quad (i=1,2,\cdots)$

$a(0) = 1$

$\Longrightarrow p\,[a(i+1)-a(i)] = q\,[a(i)-a(i-1)]$

$$\Longrightarrow \begin{cases} a(i) = \alpha + \beta \left(\dfrac{q}{p}\right)^i & (p \neq q) \\ a(i) = \alpha + \beta i & (p = q = \frac{1}{2}) \end{cases}$$

と、ある $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ を用いて書ける.

(i) $p<q$ のとき　$0 \leq a(i) \leq 1 \ (\forall i)$ より　$\beta = 0$　(さもなくば $a(i) \nearrow \infty$ or $\searrow -\infty$)

よって $a(0)=1$ から $\alpha=1$ なので $a(i)=1 \ (\forall i)$

$\longrightarrow$ 必ず破産する

(ii) $p=q$ のとき　$0 \leq a(i) \leq 1$ より

やはり $\beta=0$

$a(0)=1$ より $\alpha=1$ で $a(i)=1 \ (\forall i)$

$\longrightarrow$ 必ず破産する.

(iii) $p>q$ のとき　$i \to \infty$ で $a(i) \to \alpha$ である.

一方, $i=0$ で $a(0)=\alpha+\beta=1$

よって 最小の非負解は $\alpha=0$, $\beta=1$ で達成される.

つまり,

$$a(i) = \left(\frac{q}{p}\right)^i$$

$\longrightarrow$ 運が良ければ破産しない

<u>Thm</u>（平均再帰時間の性質と正再帰性の条件）

任意の i, j に対し、

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{l=1}^{n} p^{(l)}(i,j) = \frac{f(i,j)}{m(j,j)}$$

← 到達確率（$f(i,j)$）

← 平均再帰時間（$m(j,j)$）

特に j が正再帰的 $\iff \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{l=1}^{n} p^{(l)}(j,j) > 0$

（$m(j,j)<\infty$）

（証明はCorの下）

<u>直感的説明</u>：$\frac{1}{n}\sum p^{(l)}(i,j)$ は"i から出発して n ステップ目までに平均的に j に滞在していた時間の割合"である。

→ まず i から j へ到達する確率 $f(i,j)$、j に到達したら $m(j,j)$ 時間後に j に戻るので、平均的に $\frac{1}{m(j,j)}$ の割合で j に滞在していることになる。 //

<u>Cor</u>　I が<u>既約</u>であるとする。

(i) j が正再帰的なら $^\forall i \in I$ に対し

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n}\sum_{l=1}^{n} p^{(l)}(i,j) = \frac{1}{m(j,j)} > 0$$

(ii) j が零再帰的なら、$^\forall i \in I$ において

$$\lim_{n\to\infty} p^{(n)}(i,j) = 0$$

（∵ (i)：I が既約で j が再帰的なら $f(i,j)=1$ であることはすでに示している。
よって (i) は Thm より示せる
(ii) は自明ではない。証明は省略。）

(Thmのproof)

$$Z_n = \begin{cases} 1 & (X_n = j) \\ 0 & (X_n \neq j) \end{cases}$$ とする。

$N_j(n) = \sum_{k=1}^{n} Z_k$ とする。（時刻 n までに j にいた回数）

$$E[N_j(n) \mid X_0 = i] = \sum_{k=1}^{n} E[Z_k \mid X_0 = i] = \sum_{k=1}^{n} p^{(k)}(i,j)$$ に注意する。

(i) まず $i=j$ で考える（$X_0 = i = j$）

$T_j^{(k)}$ を状態 j を k 回目に訪れた時間とする（$T_j^{(k)} = \inf\{n \geq 1 \mid N_j(n) \geq k\}$）

そんな n が無ければ ∞ とする

$T_j^{(0)} = 0$ とする。

$t_k = T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}$ とおく。すると、t_k は独立同一分布に従う。(Markov性)
よって、大数の強法則より

$$\frac{T_j^{(k)}}{k} = \frac{t_1 + t_2 + \cdots + t_{k-1} + t_k}{k} \xrightarrow[(k\to\infty)]{a.s.} E[t_1] = E[T_j \mid X_0 = j]$$
$$= m(j,j)$$

(これは $m(j,j)=\infty$ を許す)
(零再帰的でもO.K.)

また、$T_j^{(k)}$ の定義より $T_j(N_j(n)) \leq n < T_j^{(N_j(n)+1)}$
なので、

$$\frac{T_j^{(N_j(n))}}{N_j(n)} \leq \frac{n}{N_j(n)} < \frac{T_j^{(N_j(n)+1)}}{N_j(n)+1} \cdot \frac{N_j(n)+1}{N_j(n)}$$

である。

前回資料より
$(\rho(j,j)=1)$

(a) ここで j が再帰的であると仮定すると $N_j(n) \longrightarrow \infty$ (a.s.)
よって、

$$\frac{n}{N_j(n)} \longrightarrow m(j,j) \quad (a.s.)$$

(b) 一方 j が非再帰的なら $P(\lim_{n\to\infty} N_j(n) < \infty \mid X_0 = j) = 1$ なので。

$$\parallel$$
$$1-\rho(j,j)$$

$$\frac{n}{N_j(n)} \longrightarrow \infty \quad (a.s.)$$

である。一方、jが非再帰的なら $m(j,j)=\infty$ でもあるので。

$$\frac{n}{N_j(n)} \longrightarrow m(j,j) \quad (a.s.)$$ を得る。

(ii) $i \neq j$ のとき。

$$\frac{T_j^{(k)}}{k} = \underbrace{\frac{t_1}{k}}_{= \frac{T_j}{k}} + \frac{t_2 + \cdots + t_k}{k} \xrightarrow[(k\to\infty)]{a.s.} \begin{cases} m(j,j) & (T_j < \infty) \\ \infty & (T_j = \infty) \end{cases}$$

(i),(ii)より、いずれにしても

$$\frac{n}{N_j(n)} \longrightarrow \begin{cases} m(j,j) & (\text{if } T_j < \infty) \\ \infty & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (a.s.)$$

$$\Longrightarrow \frac{N_j(n)}{n} \xrightarrow{a.s.} \frac{1}{m(j,j)} \mathbb{1}[T_j < \infty] \quad (a.s.)$$

両辺の期待値をとれば、ルベーグの優収束定理より

$$\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n}p^{(\ell)}(i,j) = \lim_{n\to\infty}E\left[\frac{N_j(n)}{n}\,\middle|\,X_0=i\right]$$

$$= E\left[\lim_{n\to\infty}\frac{N_j(n)}{n}\,\middle|\,X_0=i\right]$$

$$= E\left[\frac{1}{m(j,j)}\mathbb{1}[T_j<\infty]\,\middle|\,X_0=i\right]$$

$$= \frac{1}{m(j,j)}\cdot P(T_j<\infty\mid X_0=i) = \frac{f(i,j)}{m(j,j)}$$

//

定常分布と極限分布

__Def__ (定常分布)

$\pi = (\pi(1), \pi(2), \ldots)$: I 上の分布

π が定常分布 $\overset{\text{def}}{\iff}$ $\underline{\pi = \pi\mathbb{P}}$ $\left(\pi(j) = \sum_{i\in I}\pi(i)\mathbb{P}(i,j)\right)$

: 平衡方程式

//

※ Markov 連鎖で更新しても分布が変わらない。

(定常分布が存在するとは限らない)

__Def__ (極限分布)

$\pi_n(j) := \sum_{i\in I}\pi_0(i)\,P^{(n)}(i,j)$ (π_0 は初期分布)

(n ステップ目にどの状態にいやすいかを表した分布)

π が極限分布 $\overset{\text{def}}{\iff}$ 任意の π_0 に対し、

$$\lim_{n\to\infty}\pi_n(j) = \pi(j) \quad (^\forall j\in I)$$

(離散分布なので法則収束)

//

(極限分布が存在するとは限らない)

$$\lim_{n\to\infty}\mathbb{P}^{(n)} = \mathbb{P}^{(\infty)} = \begin{pmatrix}\pi\\ \pi\\ \vdots\end{pmatrix}$$

極限分布

という形をしていなければいけない。

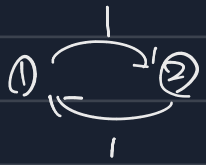
※ $\pi_0(j) = (0,0,\ldots,0,1,0,0,\ldots)$ とすればわかる。

Note

・極限分布が存在すれば、それは一意的な定常分布である。
→ チェックせよ。

・定常分布が存在しても極限分布が存在するとは限らない。

反例：
$$\pi=\left(\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right),\quad P=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix} \Longrightarrow \pi P=\pi$$ より、π は定常分布



しかし、
$$P^{(n)}=\begin{cases} P & (n:\text{奇数})\\ \begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} & (n:\text{偶数})\end{cases}$$

→ 周期性がある

$\pi_0=(1\ \ 0)$ とすると、

$$\pi_n=\begin{cases}(0\ \ 1) & (n:\text{奇数})\\ (1\ \ 0) & (n:\text{偶数})\end{cases}$$

→ 収束しない。 $\boxed{\text{極限分布は存在しない。}}$

Thm（マルコフ連鎖の定常分布）

マルコフ連鎖は既約であると仮定する。
すると、以下は同値

(1) ある $j\in I$ が正再帰的
(2) 全ての $j\in I$ が正再帰的
(3) 定常分布 π が存在する。

（(1),(2)より正再帰性はクラスの性質）

(1),(2),(3)のもと、定常分布は一意に定まり、

$$\pi(j)=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{l=1}^{n}p^{(l)}(j,j)=\frac{1}{m(j,j)}$$

で与えられる。（j から j に戻ってくるまでの平均時間 $m(j,j)$ → j に平均的に $\frac{1}{m(j,j)}$ の割合で滞在）

Lem 正再帰的な j に対し、

$$\mu(i)=\sum_{n=0}^{\infty}P(X_n=i,\ T_j>n \mid X_0=j)$$ ← j を出発して再び j に戻るまでにどれくらい i にいたか

とおくと、$\pi(i)=\dfrac{\mu(i)}{m(j,j)}$ は定常分布になる。

（I の既約性は仮定していない。定常分布は一意とは限らない）
（$\pi(i)$ は j を出発して j に戻るまでに、どれくらい $i\in I$ に滞在していたかを表す。）

(Lem の Proof) まず $\mu(j) = P(X_0=j, T_j>0 \mid X_0=j) = 1$ である.
($P(T_j<\infty \mid X_0=j)=1$ に注意)

また. $$\sum_{i\in I}\mu(i) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i\in I}P(X_n=i, T_j>n \mid X_0=j)$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty}P(T_j>n \mid X_0=j)$$
$$= \sum_{n=1}^{\infty}P(T_j\geq n \mid X_0=j)$$
$$= E[T_j \mid X_0=j] = m(j,j)$$

なので. π は確率分布になる.

$\overline{P}^{(l)}(j,i) = P(X_l=i, T_j>l \mid X_0=j)$ とすると. μ の定義より
$$\sum_i \mu(i)\,P(i,k) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_i \overline{P}^{(l)}(j,i)\,P(i,k)$$
である. 右辺 $=\mu(k)$ なら $\pi(\propto\mu)$ は定常分布になる.

(i) ($k\neq j$ のとき)
$$\sum_i \overline{P}^{(l)}(j,i)\,P(i,k)$$
$$= \sum_i P(X_l=i, T_j>l, X_{l+1}=k \mid X_0=j)$$
$$= P(T_j>l, X_{l+1}=k \mid X_0=j)$$
$$= P(T_j>l+1, X_{l+1}=k \mid X_0=j) \quad (\because j\neq k)$$
$$= \overline{P}^{(l+1)}(j,k)$$
ここで. $\sum_{l=0}^{\infty}$(右辺) $= \mu(k)$ はすぐ分かる. ($j\neq k$ に注意)

(ii) ($k=j$ のとき)
上と同様に
$$\sum_i \overline{P}^{(l)}(j,i)\,P(i,k) = \sum_i P(X_l=i, T_j>l, X_{l+1}=\overset{k}{\overset{\shortparallel}{j}} \mid X_0=j)$$
$$= P(T_j=l+1 \mid X_0=j)$$

このとき.
$$\sum_{l=0}^{\infty}(\text{右辺}) = P(T_j<\infty \mid X_0=j) = 1 = \mu(j)$$
//

(Proof of Thm)

(2) $\to$ (1) は明らか.

(1) $\to$ (2)

$i \in I$ を任意に取る. $j \in I$ は正再帰的であるとする.
既約性より. $i \leftrightarrow j$ である.
よって. $\exists k, m \in \mathbb{N}$ で $p^{(k)}(i,j) > 0$, $p^{(m)}(j,i) > 0$ より.

$$\begin{aligned}
\frac{1}{m(i,i)} &= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{l=1}^{n} p^{(l)}(i,i) \\
&\geqq \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n+m+k} \sum_{l=1}^{n} \underbrace{p^{(k)}(i,j)}_{>0} p^{(l)}(j,j) \underbrace{p^{(m)}(j,i)}_{>0} \\
&= \underbrace{p^{(k)}(i,j)}_{>0} \underbrace{p^{(m)}(j,i)}_{>0} \underbrace{\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n+m+k} \sum_{l=1}^{n} p^{(l)}(j,j)}_{= \frac{1}{m(j,j)} > 0} \\
&> 0
\end{aligned}$$

($\because$ j は正再帰的, m の性質より)

つまり i は正再帰的.

(2) $\to$ (3) $\forall i$ が正再帰的なら. 直前の Lem より
ある定常分布が存在する.

(3) $\to$ (2)

既約性より、定常分布 π に対し. $\pi(j) > 0$ なる j について.
$\forall i \in I$ で $j \to i$ である. よって. ある $n \in \mathbb{N}$ で $p^{(n)}(j,i) > 0$
とできる. よって

$$\pi(i) = \sum_{j'} \pi(j') p^{(n)}(j',i) \geqq \pi(j) p^{(n)}(j,i) > 0$$

となる. 一方. $\forall j \in I$ において

$$\begin{aligned}
\pi(j) &= \frac{1}{n} \sum_{l=1}^{n} \Big(\underbrace{\sum_{k} \pi(k) p^{(l)}(k,j)}_{= \pi(j)} \Big) \\
&= \sum_{k \in I} \pi(k) \left(\frac{1}{n} \sum_{l=1}^{n} p^{(l)}(k,j) \right) \\
&\xrightarrow[\text{優収束定理}]{n\to\infty} \sum_{k \in I} \pi(k) \frac{f(k,j)}{m(j,j)}
\end{aligned}$$

($\because$ π は定常分布なので)

これと $\pi(j)>0$ を合わせると、$\frac{1}{m(j,j)}>0$ である。

よって、$m(j,j)<\infty$、つまり j は正再帰的。特に j は再帰的。

既約性と再帰性より、$f(k,j)=1$ ($^\forall k$) となり、$\pi(j)=\frac{1}{m(j,j)}$ が成り立つ。

(一意性) 上の議論で、$\pi(j)=\frac{1}{m(j,j)}$ が言えてしまっているので、一意性も示されている。 //

Def (周期性)
i の周期 $d(i)$: $p^{(n)}(i,i)>0$ なる $n\geq 1$ の最大公約数

Lem
$i\longleftrightarrow j$ なら $d(i)=d(j)$ (周期はクラスの性質)

Thm (極限分布の存在条件)
マルコフ連鎖が既約であるとする。

連鎖が $\begin{cases}\text{正再帰的}\\\text{非周期的}\end{cases}$ $\Longleftrightarrow$ 極限分布が存在

Note この極限分布は定常分布で $\pi(j)=\frac{1}{m(j,j)}$ で与えられる。

正再帰的なら定常分布が存在

Lem 既約で正再帰的なマルコフ連鎖が非周期的なら $^\forall i,j\in I$ で

$$\lim_{n\to\infty}p^{(n)}(i,j)=\frac{1}{m(j,j)}=\pi(j)\quad(\text{定常分布}).$$

周期的 ($d(i)\geq 2$) なら、$p^{(n)}(i,j)$ は収束しない。

(証明は、カップリング法による。補足資料を参照のこと)

(Proof of Thm)

($\Rightarrow$) Lem による.

($\Leftarrow$) 極限分布が存在すれば、定常分布が存在するので、正再帰的.

また、先の Lem より周期的なら $p^{(n)}(i,j)$ は収束せず.

極限分布が存在しなくなるので、非周期的でなくてはいけない.

//

Thm (大数の強法則)

既約かつ定常分布 π が存在するとき. (極限分布の存在は仮定しない)

$f: I \longrightarrow \mathbb{R}$ が $\sum_{i\in I} |f(i)|\pi(i) < \infty$ (つまり $E_{i\sim\pi}[|f(i)|] < \infty$ 可積分)

なら.

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(\underset{\uparrow}{X_k}) \longrightarrow E_\pi[f(X)] \quad (a.s.)$$

マルコフ連鎖

//

※ 大数の強法則により、MCMC法が正当化される.