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

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

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

$m(i,i)$ を平均再帰時間と呼ぶ

同じ

Def (正再帰性)

i: 再帰的とする. このとき,

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

(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

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

iからjへ1stepで到達

iからkに行ってから jに到達するのに必要なstep数

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

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

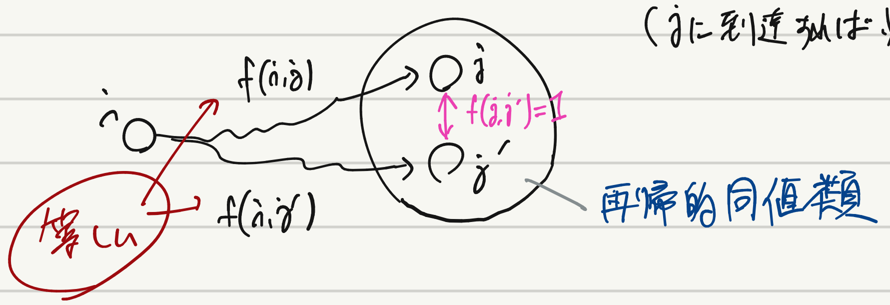
Prop jが再帰的かつ $j \to j'$ なら $f(j,j')=1$ である。

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

$$f(i,k) = P(T_k < \infty \mid X_0 = i) \geqq \underbrace{P(T_j \leqq T_k < \infty \mid T_j < \infty) P(T_j < \infty \mid X_0 = i)}$$

↑ 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、$f(i,k) \leqq f(j,k)$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
$$\begin{cases} k \in C(j) & \Rightarrow f(k,j) = 1 \\ k \in I - C(j) - T & \Rightarrow f(k,j) = 0 \end{cases}$$
（分解定理）

なので、

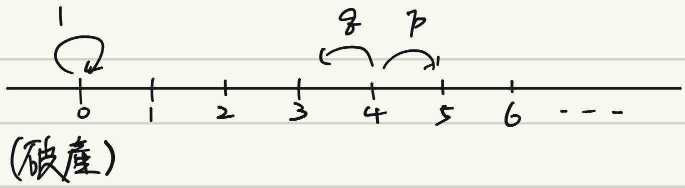
$$\boxed{f(i,j) = \sum_{k \in C(j)} P(i,k) + \sum_{k \in T} P(i,k) f(k,j)}$$

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

$a(0) = 1$

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

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

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 $a(i) \to \infty$ or $-\infty$)

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

Thm (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、

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

到達確率

平均再帰時間

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

($\Leftrightarrow m(j,j)<\infty$)

(証明はCorの下)

直感的説明: 左辺 $p^{(\ell)}(i,j)$ 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。 //

Cor I が既約であるとする。

(i) j が正再帰的なら $\forall i \in I$ に対し

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

(ii) j が零再帰的なら、$\forall i \in I$ において

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

($\because$ (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)

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

なので

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

(零再帰的でもo.k.)

である。

(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.)

(前回資料より $(g(j,j)=1)$)

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

($= 1 - g(j,j)$)

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

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

$$\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n}p^{(\ell)}(i,j) = \lim_{n\to\infty}E\left[\frac{N_j(n)}{n}\,\middle|\,X_0=i\right]$$
$$= E\left[\lim_{n\to\infty}\frac{N_j(n)}{n}\,\middle|\,X_0=i\right]$$
$$= E\left[\frac{1}{m(j,j)}\mathbb{1}[T_j<\infty]\,\middle|\,X_0=i\right]$$
$$= \frac{1}{m(j,j)}\cdot P(T_j<\infty\mid X_0=i) = \frac{f(i,j)}{m(j,j)}$$

//

$\boxed{\text{定常分布と極限分布}}$

Def (定常分布)

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

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

: 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るかを表した分布)

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)

$$\lim_{n\to\infty}\mathbb{P}^{(n)} = \mathbb{P}^{(\infty)} = \begin{pmatrix}\pi\\ \pi\\ \vdots\end{pmatrix}$$ という形をしていなければいけない。

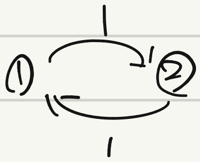
極限分布

← $\pi_0(j) = (0,0,\dots,0,1,0,0,\dots)$ 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：$\pi=(\frac{1}{2},\frac{1}{2})$, $P=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$ $\Rightarrow$ $\pi P=\pi$ より、π は定常分布



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

→ 周期性がある

$\pi_0=(1\ 0)$ とすると、

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

→ 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、

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

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

とすると、$\pi(i)=\dfrac{\mu(i)}{m(j,j)}$ 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) $= \mu(k)$ はすぐわかる. ($j \neq k$ 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) → (1) は明らか.

(1) → (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. $i \longleftrightarrow j$ 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.

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

(∵ j は正再帰的, m の性質より)

つまり i は正再帰的.

(2) → (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) → (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

$$\pi(j) = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^{n} \Big(\underbrace{\sum_{k} \pi(k) p^{(l)}(k,j)}_{=\pi(j)} \Big)$$

(∵ $= \pi(j)$, π は定常分布なので)

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

これと $\pi(j)>0$ を合わせると $\dfrac{1}{m(j,j)}>0$ 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、$\pi(j)=\dfrac{1}{m(j,j)}$ が成り立つ。

(一意性) 上の議論で、$\pi(j)=\dfrac{1}{m(j,j)}$ 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 $\pi(j)=\dfrac{1}{m(j,j)}$ 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 $p^{(n)}(i,i)$ 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. //

<u>Thm</u> (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 $\underset{\text{可積分}}{E_{i\sim\pi}[|f(i)|] < \infty}$)

なら,

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \underbrace{f(X_k)}_{\text{マルコフ連鎖}} \longrightarrow E_\pi[f(X)] \quad (a.s.)$$

//

※ 大数の強法則により、MCMC 法が正当化される.