12.16 マルコフ連鎖を順向きにも逆向きにも

ワークシート

問題

STEP III 1996、問 12

先に進む前に、まず問題を読んでおこう。問題は STEP Support Programme の問題データベースにある：

step.maths.org/questions/96-s3-q12

ヒント

まずは自力で問題に取り組んでみよう。行き詰まったら、ヒントを**一つずつ**読み、そのたびに問題に戻ること。**手を止めて、やってみよう**と記したヒントが重要な段階である。各ヒントの後には計算用の余白がある。

? **考えてみよう**　「各行の和が 1 である」という条件は何を意味するか。各列の和は 1 になるか。

段階 1　ーステップ

扱う内容：小問 (i)

? **考えてみよう**　現在の定理の種類で条件付けし、全確率の法則（law of total probability）を用いよ。

段階 2 定常分布

扱う内容：小問 (ii)

手を止めて、やってみよう $a_1 + a_2 + a_3 = 1$ のもとで、$j = 1,2,3$ について $a_j = a_1 p_{1j} + a_2 p_{2j} + a_3 p_{3j}$ を書き出してみよ。最初に扱うのに最も簡単な式はどれか。

段階 3　連鎖を逆向きにたどる

扱う内容：小問 (iii)

> **考えてみよう**　q_{ij} は、この定理が種類 j であるという条件のもとで、直前の定理が種類 i であった確率である。ベイズの定理（Bayes' theorem）を用い、両方の定理について小問 (ii) の答えを使え。

背後にある数学

平衡への収束

エックス教授が任意の定理から始めたとしよう。そこから n 個の定理の後、種類の分布は $\mathbf{a}_0 P^n$ である。この連鎖のように、どの種類の後にもどの種類も続きうる連鎖では、出発点によらず、P^n はすべての行が定常分布 $(\tfrac{1}{6}, \tfrac{1}{3}, \tfrac{1}{2})$ に等しい行列に収束（convergence）する。収束の速さは P の残りの固有値（ここでは 0.2 と 0.1）によって決まり、それらの寄与は等比数列的に小さくなる。わずか数個の定理の後には、彼女の過去は忘れ去られてしまうのである。マルコフ連鎖に関するこの**エルゴード定理**（ergodic theorem）は、大学 2 年次の確率論の講義の中心的な結果であり、マルコフ連鎖モンテカルロ法（Markov chain Monte Carlo）が機能する根拠でもある。複雑な分布からサンプルを得るには、その分布を定常分布にもつマルコフ連鎖を設計し、長時間走らせればよい。

可逆性

逆向きの連鎖 (q_{ij}) は順向きの連鎖 (p_{ij}) とは異なる。つまり、彼女の定理の長い記録を見れば、時間の向きを見分けることができる。逆向きと順向きが一致する連鎖、すなわちすべての i、j について $a_i p_{ij} = a_j p_{ji}$ が成り立つ連鎖を**可逆**（reversible）であるという。ネットワーク上のランダムウォーク（random walk）や、熱平衡（thermal equilibrium）にある物理系のモデルがその例である。可逆性は強力な性質である。定

常分布を容易に求められるようになるからである。

マルコフとプーシキン

アンドレイ・マルコフ（Andrey Markov）は1906年に自らの連鎖を導入した。その動機の一つは、大数の法則（law of large numbers）が成り立つには独立性（independence）が必要だと主張していた数学者パーヴェル・ネクラーソフ（Pavel Nekrasov）との論争において、独立性は必要ないことを示すことであった。1913年、マルコフはこの考えをプーシキン（Pushkin）の韻文小説**エヴゲーニイ・オネーギン**の最初の20 000文字に適用した。各文字を母音か子音かに分類し、各文字の種類が直前の文字の種類に依存し、その依存の仕方が2状態の連鎖でよく記述できることを示したのである。これは文章に対する最初の統計的分析であり、あらゆる予測変換システムの祖先である。

次の一歩

1 **ウサギの巣穴。** STEP III 2003、問13（step.maths.org/questions/03-s3-q13）に挑戦せよ。各頂点に出口のある正方形の頂点上のランダムウォークを、最初の1ステップに関する方程式によって解く問題である。

2 **2ステップ。** エックス教授の直前の定理が新しく正しいものであったとき、その次の次の定理が三つの種類それぞれである確率を求めよ。

3 **固有値。** P の固有値が1、0.2、0.1であることを示せ。

4 **可逆か？** エックス教授の連鎖について $a_i p_{ij} = a_j p_{ji}$ が成り立つかどうか確かめよ。その答えから何がわかるか。

さらに学ぶために

- **James Norris, *Markov Chains***（Cambridge University Press）。学部生向けの標準的な教科書である。
- **Olle Häggström, *Finite Markov Chains and Algorithmic Applications***（Cambridge University Press）。簡潔で、マルコフ連鎖モンテカルロ法の解説に優れる。
- **Brian Hayes, “First links in the Markov chain”**, *American Scientist* 101 (2013)。マルコフによるプーシキンの分析を改めて紹介する記事である。

詳しい解説付きの解答は第 12.16 節にある：

https://beyondstep.keithmcnulty.org/ja/ch12/markov.html

毎週 1 問の STEP の問題を丁寧に解き明かす The STEP Up。メールで無料配信中：keithmcnulty.substack.com