解答例

STEP III 1996、第 12 問

確率・統計 ・ マルコフ連鎖

> **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

この問題は、*Beyond STEP* の第 12.16 節「**マルコフ連鎖を順向きにも逆向きにも**」で詳しく解説されている：https://beyondstep.keithmcnulty.org/ja/ch12/markov.html

鍵となる考え方

これはマルコフ連鎖（Markov chain）である。次の定理の種類は、現在の定理の種類だけで決まる。小問 (i) は、現在の定理の種類で条件づけた全確率の法則（law of total probability）である。小問 (ii) は、連鎖によって変化しない分布（**定常**分布（stationary distribution））を求める問題であり、小さな連立一次方程式に帰着する。小問 (iii) は連鎖を逆向きにたどる問題であり、条件付き確率を逆転させることはまさにベイズの定理（Bayes' theorem）が行うことである。

解答

定理に順に番号をつける。ある定理の種類を X、その次の定理の種類を Y とし、

$$\mathrm{P}(X = i) = a_i, \qquad \mathrm{P}(Y = j \mid X = i) = p_{ij}, \qquad \mathrm{P}(Y = j) = b_j.$$

とする。

小問 (i)

事象 $\{X = 1\}$、$\{X = 2\}$、$\{X = 3\}$ は互いに排反であり、どの定理も 3 つの種類のうちちょうど 1 つに属するので、いずれか 1 つは必ず起こる。したがってこれらは標本

空間を分割し、事象 $\{Y=j\}$ は互いに素な 3 つの部分に分かれる：

$$\{Y=j\} = \{X=1, Y=j\} \cup \{X=2, Y=j\} \cup \{X=3, Y=j\}.$$

各部分の確率を足し合わせ、それぞれを $\mathrm{P}(X=i)\,\mathrm{P}(Y=j \mid X=i)$ と書けば、

$$b_j = \sum_{i=1}^{3} \mathrm{P}(X=i)\,\mathrm{P}(Y=j \mid X=i) = a_1 p_{1j} + a_2 p_{2j} + a_3 p_{3j},$$

となり、これが全確率の法則である。ここで与えられた観察が使われている。すなわち、現在の定理より前に何が起こったかにかかわらず、$\mathrm{P}(Y=j \mid X=i)$ は p_{ij} である。

小問 (ii)

各 j について $b_j = a_j$ が必要であり、さらに a_i は確率分布をなすので $a_1 + a_2 + a_3 = 1$ も必要である。表の列を縦に読むと、3 つの方程式は

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.3a_1 + 0.2a_2 + 0.1a_3, \\ a_2 &= 0.3a_1 + 0.4a_2 + 0.3a_3, \\ a_3 &= 0.4a_1 + 0.4a_2 + 0.6a_3. \end{aligned}$$

である。

考えてみよう 未知数 3 つに方程式 3 つ、さらに $a_1 + a_2 + a_3 = 1$ がある。方程式が 1 つ多すぎるのではないか？

そうではない。3 つの方程式は独立ではないからである。表の各行の和は 1 なので、3 式を足すと $a_1 + a_2 + a_3 = a_1 + a_2 + a_3$ となる。したがってどの 2 式からも残りの 1 式が導かれ、解を確定させるのは正規化条件である。

真ん中の方程式が扱いやすい。そこでは a_1 と a_3 の係数が等しいからである。$a_1 + a_3 = 1 - a_2$ を用いると、

$$a_2 = 0.3(1-a_2) + 0.4a_2 \quad\Longrightarrow\quad 0.9a_2 = 0.3 \quad\Longrightarrow\quad a_2 = \tfrac{1}{3}.$$

よって $a_1 + a_3 = \frac{2}{3}$ である。第 1 式を 10 倍すると $7a_1 = 2a_2 + a_3 = \frac{2}{3} + a_3$ となり、$a_3 = \frac{2}{3} - a_1$ を代入すると、

$$7a_1 = \tfrac{4}{3} - a_1 \quad\Longrightarrow\quad a_1 = \tfrac{1}{6}, \qquad a_3 = \tfrac{2}{3} - \tfrac{1}{6} = \tfrac{1}{2}.$$

第 3 式を確かめる：$0.4 \cdot \frac{1}{6} + 0.4 \cdot \frac{1}{3} + 0.6 \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{15} + \frac{2}{15} + \frac{3}{10} = \frac{1}{2} = a_3$。よって

$$a_1 = \tfrac{1}{6}, \qquad a_2 = \tfrac{1}{3}, \qquad a_3 = \tfrac{1}{2}.$$

つまり長い目で見ると、エックス教授の定理の半分は誤りである。

小問 (iii)

今度は X を直前の定理の種類、Y を注目する定理の種類とし、X は小問 (ii) の分布に従うとする。求めたいのは $q_{ij} = \mathrm{P}(X = i \mid Y = j)$ である。ベイズの定理により、

$$q_{ij} = \frac{\mathrm{P}(X = i)\,\mathrm{P}(Y = j \mid X = i)}{\mathrm{P}(Y = j)} = \frac{a_i p_{ij}}{b_j} = \frac{a_i p_{ij}}{a_j},$$

ここで最後の等号には小問 (ii) の $b_j = a_j$ を用いた。問題が a_i をこの値に固定しているのはこのためである。そうすれば、注目する定理はその直前の定理と同じ分布に従う。

列ごとに計算する：

- $j = 1$ $(a_1 = \frac{1}{6})$: $q_{11} = \dfrac{\frac{1}{6}\cdot 0.3}{\frac{1}{6}} = \frac{3}{10}$, $\quad q_{21} = \dfrac{\frac{1}{3}\cdot 0.2}{\frac{1}{6}} = \frac{2}{5}$, $\quad q_{31} = \dfrac{\frac{1}{2}\cdot 0.1}{\frac{1}{6}} = \frac{3}{10}$.
- $j = 2$ $(a_2 = \frac{1}{3})$: $q_{12} = \dfrac{\frac{1}{6}\cdot 0.3}{\frac{1}{3}} = \frac{3}{20}$, $\quad q_{22} = 0.4 = \frac{2}{5}$, $\quad q_{32} = \dfrac{\frac{1}{2}\cdot 0.3}{\frac{1}{3}} = \frac{9}{20}$.
- $j = 3$ $(a_3 = \frac{1}{2})$: $q_{13} = \dfrac{\frac{1}{6}\cdot 0.4}{\frac{1}{2}} = \frac{2}{15}$, $\quad q_{23} = \dfrac{\frac{1}{3}\cdot 0.4}{\frac{1}{2}} = \frac{4}{15}$, $\quad q_{33} = 0.6 = \frac{3}{5}$.

元の表と同じように（第 i 行、第 j 列に）並べると：

$$(q_{ij}) = \begin{pmatrix} \frac{3}{10} & \frac{3}{20} & \frac{2}{15} \\ \frac{2}{5} & \frac{2}{5} & \frac{4}{15} \\ \frac{3}{10} & \frac{9}{20} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.3 & 0.15 & 0.1\dot{3} \\ 0.4 & 0.4 & 0.2\dot{6} \\ 0.3 & 0.45 & 0.6 \end{pmatrix}.$$

ここで和が 1 になるのは**列**である。注目する定理の種類 j を固定すると、直前の定理はいずれかの種類であったはずだからである。

検算

- (q_{ij}) の各列の和は 1 である。たとえば $\frac{2}{15} + \frac{4}{15} + \frac{3}{5} = 1$。
- 対角成分は、式 $q_{ii} = a_i p_{ii} / a_i$ が示すとおり $q_{ii} = p_{ii}$ を満たす。
- 連鎖を 10^6 ステップ模擬実験（シミュレーション）したところ、長期的な頻度は 0.167、0.333、0.501 となり、逆向きの割合は上のすべての q_{ij} と 0.001 以内で一致した。

よくある間違い

- 表に a_i の列ベクトルを掛けてしまう（列ではなく行を使ってしまう）。方程式は $b_j = \sum_i a_i p_{ij}$ であり、和は第 j 列を縦にとる。
- $a_1 + a_2 + a_3 = 1$ を忘れ、3 つの釣り合いの方程式で a_i が決まらないことに戸惑う。
- 小問 (iii) に p_{ji} と答えてしまう。時間を逆にたどることは、表を逆向きに読むことと同じではない。$q_{12} = 0.15$ だが $p_{12} = 0.3$ なので、この連鎖は可逆ではない。

STEP のその先へ

ベクトル (a_1, a_2, a_3) はこの連鎖の定常分布であり、推移行列（transition matrix）の固有値 1 に対する左固有ベクトル（left eigenvector）である。行列のすべての成分が正であるので、最初の定理がどの種類であっても、第 n 番目の定理の種類の分布はこれに収束する。表 (q_{ij}) は**時間反転した**連鎖（time-reversed chain）を表しており、反転しても元と同じに見える連鎖（$a_i p_{ij} = a_j p_{ji}$、すなわち詳細釣り合い条件（detailed balance condition）を満たすもの）は、ランダムウォークやモンテカルロ法において中心的な役割を果たす。Grimmett and Welsh, *Probability: An Introduction*（確率論入門）には、マルコフ連鎖についての読みやすい章がある。

Beyond STEP 解答集：https://beyondstep.keithmcnulty.org/ja/。解答本文は CC0 1.0 である。問題そのものは © Cambridge University Press & Assessment に帰属し、ここには掲載していない。英語版から機械翻訳したものであり、まだ校閲を経ていない。