

1. マルコフ連鎖

マルコフ連鎖は自然科学、社会科学など多くの分野において、様々な現象の数理モデルを表現する有用な道具として活用されている。ここでは集団遺伝学で良く用いられる時間的に一様な離散時間マルコフ連鎖と連続時間マルコフ連鎖を紹介する。初めに離散時間のマルコフ連鎖について紹介しよう。

1. 1 マルコフ性と推移確率

マルコフ連鎖はある状態空間を確率的に運動する粒子の位置を記述する。このときマルコフ性はこの運動を特徴付ける性質である。簡単のために、状態空間を $S = \{1, 2, \dots, r\}$, $S = \{1, 2, 3, \dots, \dots\}$, $S = \{\dots, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots\}$ などとする。各時刻 n に S 上の値を取る確率変数を X_n ($n = 0, 1, 2, \dots$) とする。

【定義】: X_n ($n = 0, 1, 2, \dots$) が次式を満たすとき、 S 上のマルコフ連鎖という。

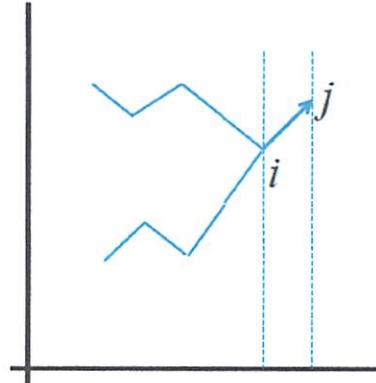
$$\begin{aligned} P(X_{n+1} = j | X_0 = a, X_1 = b, \dots, X_n = i) \\ = P(X_{n+1} = j | X_n = i) \end{aligned}$$

ただし $a, b, \dots, i, j \in S$ 。この時、

$P(i, j) = P(X_{n+1} = j | X_n = i)$ を推移確率と

いう。

すなわち過去から現在までの状態を知ったとき、次の時点の状態への推移確率は現在の状態により決まり、過去の履歴によらないということである。



補助定理 1. 1 X_n ($n = 0, 1, 2, \dots$) がマルコフ連鎖のとき次式が成り立つ。

$$\begin{aligned} P(X_{n+1} = j, X_{n+2} = k, \dots, X_{n+m-1} = p, X_{n+m} = q | X_0 = a, X_1 = b, \dots, X_n = i) \\ = P(X_{n+1} = j, X_{n+2} = k, \dots, X_{n+m-1} = p, X_{n+m} = q | X_n = i) \\ = P(i, j)P(j, k) \dots P(p, q) \end{aligned} \tag{1.1}$$

(証明) 1段目から2段目はマルコフ性から明らかである。2段目から3段目は例えば

$$\begin{aligned} P(X_2 = b, X_3 = c | X_1 = a) &= \frac{P(X_1 = a, X_2 = b, X_3 = c)}{P(X_1 = a)} \\ &= \frac{P(X_1 = a, X_2 = b)P(X_3 = c | X_1 = a, X_2 = b)}{P(X_1 = a)} = P(X_2 = b | X_1 = a)P(X_3 = c | X_2 = b) \\ &= P(a, b)P(b, c) \quad \text{となる。一般の場合も上記の操作の反復により得られる。} \end{aligned}$$

またマルコフ性の特徴として、現在の状態を指定したとき過去と未来が独立という性質が

あることを注意しておこう。すなわち次式の条件付独立性が成り立つ。

$$\begin{aligned} P(X_{n+1} = c, X_{n-1} = a | X_n = b) &= \frac{P(X_{n-1} = a, X_n = b, X_{n+1} = c)}{P(X_n = b)} \\ &= \frac{P(X_{n-1} = a, X_n = b)P(X_{n+1} = c | X_{n-1} = a, X_n = b)}{P(X_n = a)} \\ &= P(X_{n-1} = a | X_n = b)P(X_{n+1} = c | X_n = b) \end{aligned}$$

【定義】 高次の推移確率を $P^{(m)}(i, j) = P(X_{n+m} = j | X_n = i)$ とする。

$$\text{特に } P^{(0)}(i, j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (\text{if } i = j) \\ 0 & (\text{if } i \neq j) \end{cases}$$

系 1. 2 高次の推移確率について次式が成り立つ。

$$P^{(m+1)}(i, j) = \sum_{k \in S} P^{(m)}(i, k)P(k, j), \quad P^{(m+1)}(i, j) = \sum_{k \in S} P(i, k)P^{(m)}(k, j) \quad (1.2)$$

$$\text{例えれば } P^{(2)}(i, j) = \sum_{k \in S} P(i, k)P(k, j)$$

例 1. 空間 $S = \{\dots, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots\}$ 上の 1 次元ランダムウォーク

$$P(i, j) = \begin{cases} p & (j = i+1 \text{ のとき}) \\ q & (j = i-1 \text{ のとき}) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases} \quad (\text{ただし } p + q = 1) \text{ とする。}$$

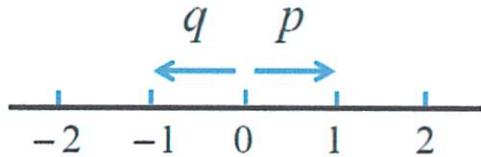
このとき、高次の推移確率は

$$P^{(2)}(0, 2) = P(0, 1)P(1, 2) = p^2 \quad \text{同様にして}$$

$$P^{(2)}(0, 0) = 2pq, \quad P^{(2)}(0, -2) = q^2$$

$$P^{(3)}(0, 3) = p^3, \quad P^{(3)}(0, 1) = 3p^2q,$$

$$P^{(3)}(0, -1) = 3pq^2, \quad P^{(3)}(0, -3) = q^3$$



【定義】 マルコフ連鎖 $\{X_n\}$ の確率分布 $\Pi_n = (\pi_n(k); k \in S)$ は
 $\pi_n(k) = P(X_n = k), k \in S$ で定義される。

特に $\{X_0\}$ の分布 $\Pi_0 = (\pi_0(k); k \in S)$ を初期分布という $\sum_{k \in S} \pi_0(k) = 1$ 。

補助定理 1. 3

$$\pi_n(k) = \sum_{j \in S} \pi_0(j) P^{(n)}(j, k) \quad k \in S. \text{ が成り立つ。}$$

(証明)

$$\begin{aligned} \pi_n(k) &= P(X_n = k) = \sum_{j \in S} P(X_0 = j, X_n = k) = \sum_{j \in S} P(X_0 = j) P(X_n = k | X_0 = j) \\ &= \sum_{j \in S} \pi_0(j) P^{(n)}(j, k) \end{aligned}$$

[定義] 推移行列 有限集合 $S = \{1, 2, 3, \dots, r\}$ 上の有限マルコフ連鎖

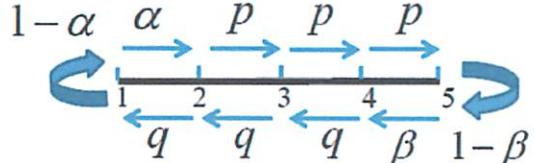
行列 $P = (P_{k,j})$ (k, j) 成分が $P_{k,j} = P(k, j)$ の $r \times r$ 行列。

$$P = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots & P_{1r} \\ P_{21} & P_{22} & \dots & P_{2r} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ P_{r1} & P_{r2} & \dots & P_{rr} \end{pmatrix} \quad \sum_{j \in S} P_{ij} = 1 \quad \text{より} \quad P \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

この行列 P を推移行列という。

例 2 推移行列が次式で与えられる $S = \{1, 2, 3, 4, 5\}$ 上のマルコフ連鎖を考えよう。

$$P = \begin{pmatrix} 1-\alpha & \alpha & 0 & 0 & 0 \\ q & 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & q & 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & q & 0 & p \\ 0 & 0 & 0 & \beta & 1-\beta \end{pmatrix}$$



$\alpha = 1$ のとき、状態 1 は反射壁 (reflecting boundary)

$\alpha = 0$ のとき、状態 1 は吸収壁 (absorbing boundary)

$0 < \alpha < 1$ のとき状態 1 は弾性壁 (elastic boundary) という。 β についても同様。

補助定理 1. 4

高次の推移行列を $P^{(n)} = (P^{(n)}(k, j))$ とすると $P^{(n)} = P^n$ (行列 P の n 乗) となる。

(証明) 系 2 より $P^{(2)}(i, j) = \sum_{k \in S} P(i, k) P(k, j)$ 故に $P^{(2)} = P^2$ 。

数学的帰納法より任意の自然数 n について成り立つ。

例 3 2 状態マルコフ連鎖：状態空間 $S = \{1, 2\}$ 、 推移行列を $P = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.5 \\ 0.4 & 0.6 \end{pmatrix}$ とする。

$$P^{(2)} = P^2 = \begin{pmatrix} 0.45 & 0.55 \\ 0.44 & 0.56 \end{pmatrix}, \quad P^{(3)} = P^3 = \begin{pmatrix} 0.445 & 0.555 \\ 0.444 & 0.556 \end{pmatrix}$$

$$\text{一般に } P^{(n)} = P^n = \frac{1}{9} \begin{pmatrix} 4 + 5 \times 0.1^n & 5 - 5 \times 0.1^n \\ 4 - 4 \times 0.1^n & 5 + 4 \times 0.1^n \end{pmatrix} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} P^n = \frac{1}{9} \begin{pmatrix} 4 & 5 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}$$

初期分布 $\Pi_0 = (\pi_1, \pi_2)$ とすると、補助定理 3 より $\{X_n\}$ の分布 Π_n は

$$\Pi_n = \Pi_0 P^n = (\pi_1, \pi_2) \times \frac{1}{9} \begin{pmatrix} 4 + 5 \times 0.1^n & 5 - 5 \times 0.1^n \\ 4 - 4 \times 0.1^n & 5 + 4 \times 0.1^n \end{pmatrix} \text{となる。}$$

$$\pi_n(1) = \frac{1}{9} \{4 + (5\pi_1 - 4\pi_2) \times 0.1^n\}, \quad \pi_n(2) = \frac{1}{9} \{5 + (4\pi_2 - 5\pi_1) \times 0.1^n\}$$

これより、 $\lim_{n \rightarrow \infty} \Pi_n = \left(\frac{4}{9}, \frac{5}{9}\right)$ これを極限分布という。

例 4 $S = \{1, 2, 3\}$ 状態 1, 3 が反射壁であるランダムウォーク

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ q & 0 & p \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad P^2 = \begin{pmatrix} q & 0 & p \\ 0 & 1 & 0 \\ q & 0 & p \end{pmatrix}, \quad P^3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ q & 0 & p \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = P, \quad P^4 = P^3 \times P = P^2$$

一般に $P^{2m} = P^2, P^{2m+1} = P$ (振動する) 極限分布は存在しない。

【定義】既約なマルコフ連鎖

(1) i から j へ到達可能 ($i, j \in S$) \Leftrightarrow 「ある $n \geq 0$ に対して $P^{(n)}(i, j) > 0$ 」
($i \Rightarrow j$ で表す)

(2) マルコフ連鎖 X_n が既約 (irreducible) \Leftrightarrow 「任意の $i, j \in S$ に対して $i \Rightarrow j$ 」

$T(i) = \{n; n > 0, P^{(n)}(i, i) > 0\}$: i から出発し i へ戻る確率 $P^{(n)}(i, i)$ が正であるような時刻 $n (\geq 1)$ の集合。

(3) 状態 i の周期 $d_i \Leftrightarrow d_i = T(i)$ に属す自然数の最大公約数

例 4 では $d_1 = d_2 = d_3 = 2$ 各状態の周期は 2 である。

定理 1. 5

$\{X_n\}$ が既約のとき、 $i, j \in S$ に対して $d_i = d_j$ 、全ての状態は同じ周期を持つ。

(証明) $i \Leftrightarrow j$ より、ある自然数 $n > 0, m > 0$ が存在して、 $P^{(n)}(i, j) > 0, P^{(m)}(j, i) > 0$ 。

この n, m について $P^{(n+m)}(i, i) > P^{(n)}(i, j)P^{(m)}(j, i) > 0$ なので $n+m$ は d_i の倍数。

また、 $P^{(k)}(j, j) > 0$ を満たす k は d_j の倍数であるが、この k について

$P^{(n+k+m)}(i, i) > P^{(n)}(i, j)P^{(k)}(j, j)P^{(m)}(j, i) > 0$ なので $n+k+m$ は d_i の倍数。よって k は

d_i の倍数。このような k の最大公約数が d_j なので、 d_j は d_i の倍数である。 i と j を入れ替

えれば全く同様に d_i は d_j の倍数となるので、 $d_i = d_j$ である。 (終わり)

$d=1$ のとき、このマルコフ連鎖は非周期的 (aperiodic) という。例 4 のマルコフ連鎖は周期が 2 のマルコフ連鎖である。

証明は省略するが、次の定理が成り立つ。

定理 1. 6

推移行列 P を持つ状態空間が有限のマルコフ連鎖が既約で非周期的ならば、 $\lim_{n \rightarrow \infty} P^n$

および極限分布 $\lim_{n \rightarrow \infty} \Pi_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \Pi_0 P^n$ が存在し、極限分布は初期分布 Π_0 に依存しない。

【定義】 定常分布

$$\Pi = (\pi_1, \dots, \pi_r) \text{ が定常分布} \Leftrightarrow \begin{cases} \Pi P = \Pi \quad (\text{このとき、} \Pi P^n = \Pi \text{ が成り立つ}) \\ \sum_{i \in S} \pi_i = 1 \end{cases}$$

系 1. 7 極限分布 $\lim_{n \rightarrow \infty} \Pi_n$ は定常分布である。

(証明) $\Pi_n = \Pi_0 P^n = \Pi_0 P^{n-1} \times P$, $\Pi = \lim_{n \rightarrow \infty} \Pi(n)$ とすると $\Pi = \Pi P$

よって Π は定常分布。

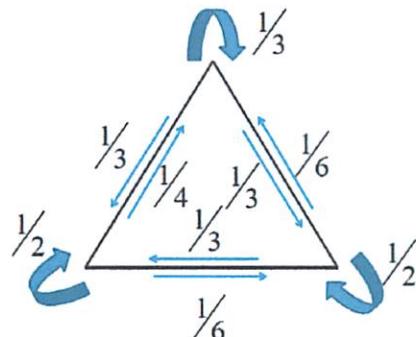
例 5

例 5. 1 状態空間 $S = \{1, 2, 3\}$ 、推移行列 $P = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ をもつマルコフ連鎖。

定常分布を $\Pi = (\pi_1, \pi_2, \pi_3)$ とすると $\Pi P = \Pi$ より

$$\begin{cases} \frac{1}{3}\pi_1 + \frac{1}{4}\pi_2 + \frac{1}{6}\pi_3 = \pi_1 \\ \frac{1}{3}\pi_1 + \frac{1}{2}\pi_2 + \frac{1}{3}\pi_3 = \pi_2 \\ \frac{1}{3}\pi_1 + \frac{1}{4}\pi_2 + \frac{1}{2}\pi_3 = \pi_3 \\ \pi_1 + \pi_2 + \pi_3 = 1 \quad \text{より} \end{cases}$$

$$\Pi = (\pi_1, \pi_2, \pi_3) = \left(\frac{6}{25}, \frac{2}{5}, \frac{9}{25}\right)。$$



例 5. 2 エーレンフェスト連鎖（熱分子あるいは気体分子の 2 つの容器間の移動モデル）

2 つの容器を A, B とし d 個のボール（分子）を $1, 2, \dots, d$ と番号付ける。

このボールの幾つかが容器 A に、残りが容器 B にある。 d 個のボールの中から任意に 1 個のボールを取り出し、他の容器に移す。毎回独立にボールを取り出し、この操作を繰り返す。 X_n を n 回の試行の後の容器 A に入っているボールの個数とすれば、 $\{X_n; n \geq 0\}$ は $S = \{0, 1, 2, \dots, d\}$ 上のマルコフ連鎖になる。この推移確率行列は

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{1}{d} & 0 & \frac{d-1}{d} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{2}{d} & 0 & \frac{d-2}{d} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad P_{k,j} = \begin{cases} \frac{d-k}{d} & (j = k+1) \\ \frac{k}{d} & (j = k-1) \\ 0 & \text{その他} \end{cases}$$

定常分布を $\Pi = (\pi_0, \pi_1, \dots, \pi_d)$ とすると $\Pi P = \Pi$, $\sum_{k=0}^d \pi_k = 1$ 。

$d = 5$ のとき、定常分布は $\pi_0 = \frac{1}{32}$, $\pi_1 = \frac{5}{32}$, $\pi_2 = \frac{5}{16}$, $\pi_3 = \frac{5}{16}$, $\pi_4 = \frac{5}{32}$, $\pi_5 = \frac{1}{32}$ 。

1. 2 到達確率と到達時間

(1) 到達確率

$S = \{1, 2, 3, \dots, r\}$ 上のマルコフ連鎖 $\{X_n; n = 0, 1, 2, \dots\}$ 、遷移確率を $P = (P(k, j); k, j \in S)$ とする。 $T_1 = \inf\{n; X_n = 1\}$, $T_r = \inf\{n; X_n = r\}$ をそれぞれ状態 1 及び r に初めて到達する時刻とする。この時、状態 k から出発し状態 1 に先に到達する確率

$u(k) = P(T_1 < T_r | X_0 = k)$ を考える。 $2 \leq k \leq r-1$ のとき、

$$\begin{aligned}
u(k) &= P(T_1 < T_r | X_0 = k) = \sum_{j=1}^r P(T_1 < T_r, X_1 = j | X_0 = k) \quad (\text{条件付確率の性質より}) \\
&= \sum_{j=1}^r P(T_1 < T_r | X_0 = k, X_1 = j) P(X_1 = j | X_0 = k) \quad (\text{マルコフ性より}) \\
&= \sum_{j=1}^r P(T_1 < T_r | X_1 = j) P(X_1 = j | X_0 = k)
\end{aligned}$$

以上より次の定理を得る。

定理 1. 8

$u(k) = P(T_1 < T_r | X_0 = k)$ 、($k \in S$) は次の方程式を満たす。

$$2 \leq k \leq r-1 \text{ のとき } \sum_{j \in S} P(k, j) u(j) = u(k) \quad , \text{ 境界条件 } u(1) = 1, u(r) = 0.$$

例 6 破産問題 (Ruin problem)

1 回の勝負で 1 ドル儲けたり損をしたりするゲームを考えよう。甲乙 2 人のプレーヤーが毎回のゲームで甲の勝つ確率は p とする (引き分けはない)。毎回勝った方が負けた方から 1 ドルもらう。甲の最初の所持金は k ドル、2 人の所持金の合計は r ドルとする。このゲームは 2 人のどちらかの所持金が 0 (破産) になるまで続けられる。甲が破産する確率を求めよ。

(解答) X_n を n 回のゲームの後の甲の所持金とすると、 X_n の推移確率行列は

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ q & 0 & p & 0 & \dots & 0 \\ 0 & q & 0 & p & \dots & 0 \\ 0 & 0 & q & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad p+q=1.$$

定理 1. 8 より $pu(k+1) + qu(k-1) = u(k)$ 、ただし $1 \leq k \leq r-1$ 、

境界条件 $u(0) = 1, u(r) = 0$ 。

これより $1 \leq k \leq r-1$ のとき、 $p(u(k+1) - u(k)) = q(u(k) - u(k-1))$ 。

$$p \neq q \text{ のとき } u(k) = \frac{\left(\frac{q}{p}\right)^r - \left(\frac{q}{p}\right)^k}{\left(\frac{q}{p}\right)^r - 1}, \quad p = q \text{ のとき } u(k) = 1 - \frac{k}{r}.$$

(2) 到達時刻

$S = \{1, 2, \dots, r\}$ 上のマルコフ連鎖 $\{X_n; n = 0, 1, 2, \dots\}$ 、推移確率行列 $P = (P(k, j))$ 、
 $T = \inf\{n; X_n = 1 \text{ または } X_n = r\}$ を境界に初めて到達する時刻とする。

$$h(k) = E[T | X_0 = k] : k \text{ から出発し境界に初めて到達するまでの平均待ち時間}$$

境界条件 $h(1) = h(r) = 0$ 。従って、 $k \neq 1, r$ のとき

$$\begin{aligned} h(k) &= \sum_{n=0}^{\infty} n P(T = n | X_0 = k) = \sum_{n=0}^{\infty} n \left\{ \sum_{j \in S} P(T = n, X_1 = j | X_0 = k) \right\} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} n \left\{ \sum_{j \in S} P(T = n | X_1 = j, X_0 = k) P(X_1 = j | X_0 = k) \right\} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} n \left\{ \sum_{j \in S} P(k, j) P(T = n - 1 | X_0 = j) \right\} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) \left\{ \sum_{j \in S} P(k, j) P(T = n | X_0 = j) \right\} \\ &= \sum_{j \in S} P(k, j) \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} n P(T = n | X_0 = j) \right\} + \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j \in S} P(k, j) P(T = n | X_0 = j) \\ &= \sum_{j \in S} P(k, j) h(j) + 1 \end{aligned}$$

ただしここで等式 $\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j \in S} P(k, j) P(T = n | X_0 = j) = \sum_{j \in S} P(k, j) = 1$ を使った。

以上より

定理 1. 9

$S = \{1, 2, \dots, r\}$ 上のマルコフ連鎖 $\{X_n; n = 0, 1, 2, \dots\}$ について、 $h(k) = E[T | X_0 = k]$ と
 すると次の方程式を満たす。 $h(k) = \sum_{j \in S} P(k, j) h(j) + 1, \quad h(1) = h(r) = 0$

例 7 破産問題

例 6 の破産問題で 2 人のプレーヤーのどちらかが破産するまでの平均待ち時間を考え
 る。状態空間 $S = \{0, 1, 2, \dots, r\}$ 、定理 1. 9 より、 $1 \leq k \leq r-1$ のとき

$$h(k) = p h(k+1) + q h(k-1) + 1, \quad h(0) = h(r) = 0. \quad p + q = 1 \text{ より}$$

$p\{h(k+1) - h(k)\} = q\{h(k) - h(k-1)\} - 1, \quad g(k) = h(k+1) - h(k)$ (階差数列) とする
 と $pg(k) = qg(k-1) - 1$ 。境界条件 $h(0) = h(r) = 0$ より、

$$p \neq q \text{ のとき } h(k) = -\frac{k}{p-q} + \frac{r}{p-q} \left\{ \frac{1 - (q/p)^k}{1 - (q/p)^r} \right\},$$

$$p = q \text{ のとき } h(k) = -k^2 + rk = k(r-k).$$

1. 3 離散時間マルコフ連鎖の例

(1) 出生死滅過程 (Birth and Death process)

生物集団の個体数モデルあるいは待ち行列理論で用いられる出生死滅過程を紹介しよう。0以上の整数からなる状態空間を S とする。 S 上のマルコフ連鎖でその推移確率が $P(k, k+1) = p_k$, $P(k, k-1) = 1 - p_k = q_k$, $P(k, k) = r_k$ で与えられるものとする。

ただし $p_k + q_k + r_k = 1$, $k = 1, 2, \dots$, $q_0 = 0$ 。この離散時間の出生死亡過程を X_n ($n = 0, 1, 2, \dots$) とする。例えば X_n は時刻 n の個体数と考えられる。このとき次のコルモゴロフ 前進方程式、後退方程式が成り立つ。

コルモゴロフ前進方程式

$$\begin{aligned} P_{n+1}(k, j) &= P_n(k, j-1)p_{j-1} + P_n(k, j+1)q_{j+1} + P_n(k, j)r_j, \quad \text{if } j \geq 1 \\ P_{n+1}(k, 0) &= P_n(k, 1)q_1 + P_n(k, 0)r_0 \quad P_0(k, j) = \delta_{k,j} \end{aligned}$$

コルモゴロフ後退方程式

$$P_{n+1}(k, j) = p_k P_n(k+1, j) + q_k P_n(k-1, j) + r_k P_n(k, j), \quad P_0(k, j) = \delta_{k,j}$$

定常分布 $\Pi = (\pi_k; k = 0, 1, 2, \dots)$

マルコフ連鎖 X_n ($n = 0, 1, 2, \dots$) の定常分布 $\Pi = (\pi_k; k = 0, 1, 2, \dots)$ は次の方程式を満たす。

$$\pi_j = \pi_{j-1}p_{j-1} + \pi_{j+1}q_{j+1} + \pi_jr_j, \quad \text{ただし } j \geq 1; \quad \pi_0 = \pi_1q_1 + \pi_0r_0.$$

$$p_k + q_k + r_k = 1, \quad k = 1, 2, \dots, \quad q_0 = 0 \text{ より}$$

$$\pi_{j+1}q_{j+1} - \pi_jp_j = \pi_jq_j - \pi_{j-1}p_{j-1}, \quad \text{ただし } j \geq 1; \quad \pi_1q_1 - \pi_0p_0 = 0.$$

$$\text{これより } \pi_{j+1}q_{j+1} - \pi_jp_j = 0 \quad (j \geq 0), \quad \text{よって } \pi_{j+1} = \frac{p_j}{q_{j+1}}\pi_j$$

$$\text{これを繰り返して } \pi_k = \frac{p_0p_1p_2\dots p_{k-1}}{q_1q_2\dots q_k}\pi_0, \quad k \geq 1. \quad \varpi_i = \frac{p_0p_1p_2\dots p_{i-1}}{q_1q_2\dots q_i} \quad (i \geq 1) \text{ とすると}$$

$$\pi_k = \varpi_k\pi_0 \quad (k \geq 0, \quad \varpi_0 = 1). \quad \text{定常分布であるためには } \sum_{k=0}^{\infty} \pi_k = 1 \text{ なので、次の定理を得る}$$

定理 1. 10

$$\sum_{k=1}^{\infty} \varpi_k = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{p_0\dots p_{k-1}}{q_1\dots q_k} < \infty \text{ のとき、唯一の定常分布を持ち } \pi_k = \frac{\varpi_k}{\sum_{i=0}^{\infty} \varpi_i} \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} \varpi_k = \infty \text{ のとき、定常分布を持たない。}$$

吸収状態を持つ出生死亡過程 ($p_0 = 0$)

$u(k) = P(\text{ある自然数 } n \text{ で } X_n = 0 \mid X_0 = k)$ を初期状態 k から 0 へ吸収される確率

$$\text{とすると、 } u(k) = p_k u(k+1) + q_k u(k-1) + r_k u(k), \quad u(0) = 1 \quad (\text{境界条件}) \quad (1.5)$$

$h(k) : \text{初期状態 } k \text{ から 0 へ吸収されるまでの平均時間}$ とすると

$$h(k) = p_k h(k+1) + q_k h(k-1) + r_k h(k) + 1, \quad h(0) = 0 \quad (\text{境界条件}) \quad (1.6)$$

定理 1. 1.1 吸収確率

$$\sum_{l=1}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^l \frac{q_j}{p_j} \right) < \infty \quad \text{のとき} \quad u(k) = \frac{\sum_{l=k}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^l \frac{q_j}{p_j} \right)}{1 + \sum_{l=1}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^l \frac{q_j}{p_j} \right)},$$

$$\sum_{l=1}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^l \frac{q_j}{p_j} \right) = \infty \quad \text{のとき} \quad u(k) = 1 \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

(証明)

$$(1.5) \text{ より} \quad u(k+1) - u(k) = \frac{q_k}{p_k} (u(k) - u(k-1)), \quad k \geq 1$$

$$\text{階差数列} \quad v(k) = u(k+1) - u(k), \quad k = 0, 1, 2, \dots \text{ とする} \quad v(k) = \frac{q_k}{p_k} v(k-1), \quad k = 1, 2, \dots$$

$$\text{よって} \quad u(k+1) - u(k) = v(k) = \left(\prod_{j=1}^k \frac{q_j}{p_j} \right) v_0, \quad k \geq 1. \quad v_0 = u(1) - u(0) = u(1) - 1 \text{ より}$$

$$u(k) = u(1) + \sum_{j=1}^{k-1} v(j) = u(1) + \{u(1) - 1\} \left(\sum_{j=1}^{k-1} \prod_{l=1}^j \frac{q_l}{p_l} \right), \quad k \geq 2 \quad (1.7)$$

$$\text{すべての } k \text{ について } 0 \leq u(k) \leq 1 \text{ なので、} \quad \sum_{l=1}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^l \frac{q_j}{p_j} \right) = \infty \text{ のとき } u(1) = 1, \text{ 従ってすべて}$$

の k について $u(k) = 1$ となる。

$0 < u(1) < 1$ のとき、このとき $\sum_{l=1}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^l \frac{q_j}{p_j} \right) < \infty$ で $u(k)$ は明らかに k の減少関数であり

$\lim_{k \rightarrow \infty} u(k) = 0$ が成り立つ (補足参照)。 (1.7) で $k \rightarrow \infty$ とすると $u(k) \rightarrow 0$ より $u(1)$ について

解くと

$$u(1) = \frac{\sum_{l=1}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^l q_j / p_j \right)}{1 + \sum_{l=1}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^l q_j / p_j \right)}, \quad \text{さらに} \quad u(k) = \frac{\sum_{l=k}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^l q_j / p_j \right)}{1 + \sum_{l=1}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^l q_j / p_j \right)}.$$

「補足」：

$X(t)$ を出生死滅過程、 $X(0) = k$ の下で、0 に吸収されない事象を E_k とする。

$P(E_k) = 1 - u_k$ 、 u_k は k の増加とともに単調減少なので、すべての k について $u_k \geq \alpha > 0$ と仮定して矛盾を示す。 $X(0) = k$ のもとで、常に $X(t) \leq k$ と仮定すると、確率 1 で 0 に吸収される。従って事象 E_k の条件の下では、必ず状態 $k+1$ へ到達する。最初に $k+1$ へ到達する時刻を T_{k+1} とする。 $k+1$ へ到達した後、再び 0 へ吸収しないことが必要である。

事象 E_k の定義関数を $I(E_k)$ とする。事象 $E_{X(T_{k+1})}$ は $k+1$ へ到達した後、0 に吸収されない事象である。 $X(0) = k$ の下で 0 に吸収されないためには、有界の領域に留まることはできず、状態 $k+2, k+3, \dots$ を必ず訪れなければならない。同様に $k+2, k+3, \dots, k+n$ へ到達する最初の時刻を $T_{k+2}, T_{k+3}, \dots, T_{k+n}$ とする。 $X(0) = k$ の下で 0 に吸収されないためには、 $k+1, k+2, \dots, k+n$ を訪れ、かつ 0 に吸収されない必要があるので

$I(E_k) \leq I(E_{X(T_{k+1})})I(E_{X(T_{k+2})}) \cdots I(E_{X(T_{k+n})})$ 。すべての $X(\min(t, T_{k+1}))$ を可測にする最小の

σ 集合体を $\mathfrak{I}_{T_{k+1}}$ とする。 $E[I(E_{X(T_{k+1})}) | \mathfrak{I}_{T_{k+1}}] = 1 - u_{k+1}$ に注意すると

$$\begin{aligned} 1 - u_k &= E[I(E_k)] \leq E[I(E_{X(T_{k+1})}) \cdots I(E_{X(T_{k+n})})] = E[E[\cdots E[I(E_{X(T_{k+1})}) \cdots | \mathfrak{I}_{T_{k+n}}] \cdots | \mathfrak{I}_{T_{k+1}}]] \\ &= (1 - u_{k+1})(1 - u_{k+2}) \cdots (1 - u_{k+n}) \leq (1 - \alpha)^n \end{aligned}$$

n は任意なので、 $n \rightarrow \infty$ とすると $1 - u_k \leq 0$ より $u_k = 1$ 、よって $\lim_{m \rightarrow \infty} u_m = 0$ 。

定理 1. 12 吸収までの待ち時間

$\rho_1 = \frac{1}{q_1}$ 、 $\rho_i = \frac{p_1 p_2 \cdots p_{i-1}}{q_1 q_2 \cdots q_i}$ ($i \geq 2$) とする。このとき

$$\sum_{i=1}^{\infty} \rho_i = \infty \quad \text{ならば} \quad h(k) = \infty, \quad k \geq 1$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} \rho_i < \infty \quad \text{ならば} \quad h(k) = \sum_{i=1}^{\infty} \rho_i + \sum_{r=1}^{k-1} \left(\prod_{i=1}^r \frac{\mu_i}{\lambda_i} \right) \left(\sum_{j=r+1}^{\infty} \rho_j \right)$$

(証明)

$$(1.6) \text{より } p_k \{h(k) - h(k+1)\} = q_k \{h(k-1) - h(k)\} + 1$$

$a(k) = h(k) - h(k+1)$ とすると $p_k a(k) = q_k a(k-1) + 1, k \geq 1$ 。これより

$$a(k) = \frac{q_k}{p_k} a(k-1) + \frac{1}{p_k} = \frac{q_k q_{k-1}}{p_k p_{k-1}} a(k-2) + \frac{q_k}{p_k p_{k-1}} + \frac{1}{p_k} \quad \text{これを繰り返して}$$

$$a(k) = \left(\prod_{j=1}^k \frac{q_j}{p_j} \right) a(0) + \sum_{i=1}^k \frac{1}{p_i} \prod_{j=i+1}^k \frac{q_j}{p_j} \quad \text{ただし } \prod_{j=k+1}^k \frac{q_j}{p_j} = 1 \text{とする。これより}$$

$$\begin{aligned} h(k) - h(k+1) &= \left(\prod_{j=1}^k \frac{q_j}{p_j} \right) \{h(0) - h(1)\} + \sum_{i=1}^k \frac{1}{p_i} \prod_{j=i+1}^k \frac{q_j}{p_j} \\ &= -h(1) \prod_{j=1}^k \frac{q_j}{p_j} + \left(\prod_{j=1}^k \frac{q_j}{p_j} \right) \sum_{i=1}^k \rho_i = \left(\prod_{j=1}^k \frac{q_j}{p_j} \right) \left(\sum_{i=1}^k \rho_i - h(1) \right) \end{aligned} \quad (1.8)$$

$$\text{ただし } \rho_i = \frac{p_1 p_2 \cdots p_{i-1}}{q_1 q_2 \cdots q_i}.$$

$h(k) \leq h(k+1)$ ので $\sum_{i=1}^k \rho_i \leq h(1)$ 。従って

$$\sum_{i=1}^{\infty} \rho_i = \infty \quad \text{ならば} \quad h(1) = \infty, \quad \text{さらに} \quad h(k) = \infty, \quad k = 1, 2, \dots$$

$\sum_{i=1}^{\infty} \rho_i < \infty$ のとき、(1.8)より $\left(\prod_{j=1}^k \frac{p_j}{q_j} \right) \{h(k) - h(k+1)\} = \sum_{i=1}^k \rho_i - h(1)$ 。このとき

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left(\prod_{j=1}^k \frac{p_j}{q_j} \right) \{h(k) - h(k+1)\} = 0 \text{ が成り立つ (証明は省略)。これより } k \rightarrow \infty \text{ とすると}$$

$$h(1) = \sum_{i=1}^{\infty} \rho_i, \quad h(k) = \sum_{i=1}^{\infty} \rho_i + \sum_{r=1}^{k-1} \left(\prod_{k=1}^r \frac{q_k}{p_k} \right) \left(\sum_{j=r+1}^{\infty} \rho_j \right), \quad k \geq 2$$

(2) 分枝過程

ゴルトン・ワトソン分枝過程 $Z_n, (n = 0, 1, 2, \dots)$ は状態空間 $S = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$ 上のマルコフ連鎖で Z_n は時刻 n の時点での粒子数を表す。各粒子は独立に次世代に Y 個の粒子を生む。ただし、 Y は非負整数值確率変数でその分布は $P(Y = k) = p_k (k = 0, 1, 2, \dots)$ で与えられる。 $Z_n = i$ のとき、次の世代の総粒子数が $Z_{n+1} = j$ となる推移確率は k 番目の個体の子供の数を Y_k とすると、 $P(i, j) = P(Z_{n+1} = j | Z_n = i) = P(\sum_{k=1}^i Y_k = j) (i \geq 1, j \geq 0)$ で与えら

れる。子供の数の分布($p_k; k = 0, 1, 2, \dots$)の確率母関数を $\varphi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} p_k x^k = E[x^k]$ および

$\varphi_n(x) = \sum_{k=0}^{\infty} P(Z_n = k) x^k$ とする。初期条件を $Z_0 = 1$ とすると明らかに $\varphi_0(x) = x$ 、

$\varphi_1(x) = \varphi(x)$ 。 $\varphi(1) = 1$ 、平均の子供数は $m = E[Y] = \sum_{k=0}^{\infty} k p_k = \frac{d}{dx} \varphi(1)$ で与えられる。ま

た初期条件 $Z_0 = j$ のときの次世代の子供の数の母関数を $\varphi^{(j)}(x)$ とすると各個体が

独立に子供を産むことより

$$\varphi^{(j)}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} x^k P(Z_1 = k | Z_0 = j) = \sum_{k=0}^{\infty} x^k P\left(\sum_{i=0}^j Y_i = k\right) = E[x^{Y_1+\dots+Y_j}] = \prod_{i=1}^j E[x^{Y_i}] = (\varphi(x))^j.$$

これより、次式がなりたつ。

$$\begin{aligned}\varphi_{n+1}(x) &= \sum_{k=0}^{\infty} P(Z_{n+1} = k) x^k = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^{\infty} P(Z_{n+1} = k | Z_n = j) P(Z_n = j) \right) x^k \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^{\infty} P\left(\sum_{i=0}^j Y_i = k\right) x^k \right) P(Z_n = j) = \sum_{j=0}^{\infty} (\varphi(x))^j P(Z_n = j) = \varphi_n(\varphi(x))\end{aligned}$$

これより $\varphi_{n+1}(x) = \varphi_n(\varphi(x)) = \varphi_{n-1}(\varphi(\varphi(x))) = \varphi_{n-1}(\varphi_2(x)) = \dots = \varphi(\varphi_n(x))$ が成り立つ。

補題 1. 1.3 確率母関数 $\varphi(x)$ は $0 \leq x \leq 1$ で単調増加、下に凸である。

(証明) $0 \leq x \leq 1$ のとき、 $\varphi'(x) = \sum_k k p_k x^{k-1} \geq 0$ 、よって単調増加

また $\varphi''(x) = \sum_k k(k-1) p_k x^{k-2} \geq 0$ より下に凸である。

1 粒子から出発した分枝過程が最終的に全ての粒子が消滅する確率を q とする

$$q = P(\text{ある } n \text{ について } Z_n = 0 | Z_0 = 1) = P(\lim_{n \rightarrow \infty} Z_n = 0 | Z_0 = 1)$$

時刻 n で消滅している確率を $q(n)$ とすると、

$$q(n) = P(Z_n = 0 | Z_0 = 1) = \varphi_n(0)$$

明らかに $Z_n = 0$ ならば $Z_{n+1} = 0$ なので $q(n) \leq q(n+1) \leq 1$

すなわち、 $q(n)$ は単調増加である。 $q(n)$ は上に有界なので極限 $q = \lim_{n \rightarrow \infty} q(n)$ が存在する。

定理 1. 1.4

消滅確率 q は方程式 $\varphi(x) = x$ の最小の正根である。

(証明) q は方程式 $\varphi(x) = x$ を満たすことを示す。

$$q = P(\lim_{n \rightarrow \infty} Z_n = 0 | Z_0 = 1) = \sum_{k=0}^{\infty} P(\lim_{n \rightarrow \infty} Z_n = 0, Y = k | Z_0 = 1)$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} P(\lim_{n \rightarrow \infty} Z_n = 0 | Y = k) P(Y = k | Z_0 = 1) = \sum_{k=0}^{\infty} q^k \times p_k = \varphi(q)$$

$\varphi(x) = x$ の任意の正根を x_0 とする。 $\varphi(x)$ は単調増加なので $q(1) = \varphi(0) < \varphi(x_0) = x_0$ 。
 $q(n) < x_0$ とすると $q(n+1) = \varphi_{n+1}(0) = \varphi(\varphi_n(0)) = \varphi(q(n)) < \varphi(x_0) = x_0$ なので、全ての n について $q(n) < x_0$ が成り立つ。故に $q = \lim_{n \rightarrow \infty} q(n) \leq x_0$ より q は最小の正根である。

定理 1. 1.5

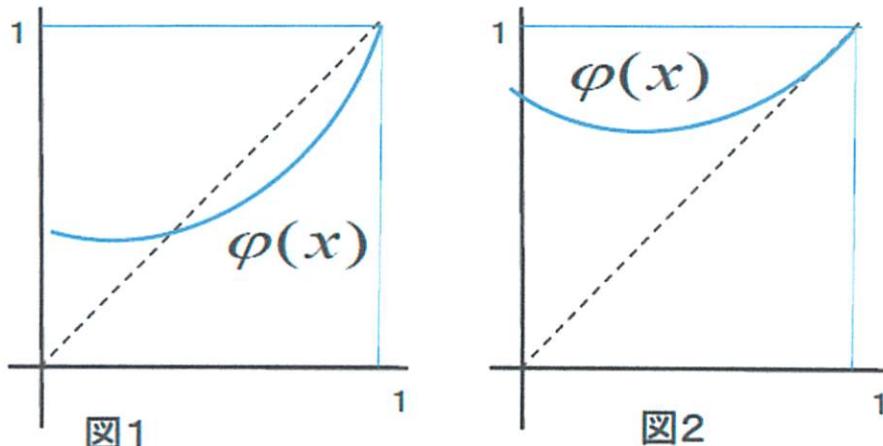
$m \leq 1$ ならば $P(\text{任意の } n \geq 0 \text{ に対して } z_n \geq 1 | Z_0 = 1) = 0$ 、すなわち $q = 1$ 、

$m > 1$ ならば $P(\text{任意の } n \geq 0 \text{ に対して } z_n \geq 1 | Z_0 = 1) = 1 - q > 0$ 、すなわち $0 < q < 1$ 。

さらに消滅確率 q は $m > 1$ のとき方程式 $q = \sum_{j=0}^{\infty} p_j q^j$ の $[0, 1)$ での唯一の解である。

(証明)

$m = \varphi'(1) > 1$ ならば、 $\varphi(x)$ の $x = 1$ における接線の勾配は 1 より大であり、図 1 のようになる。このとき、 $0 < q < 1$ である。 $m = \varphi'(1) \leq 1$ ならば $\varphi(x)$ の $x = 1$ における接線の勾配は 1 以下であり、図 2 のようになる。このとき $q = 1$ である。



幾つかの具体例を挙げみよう。

例 1) $\varphi(x) = p_0 + p_1 x$, ($p_0 + p_1 = 1$) $m = \varphi'(1) = p_1 \leq 1$ のとき $q = 1$ 。

例 2) $\varphi(x) = p_0 + p_2 x^2$, ($p_0 + p_2 = 1$) $m = \varphi'(x) = 2p_2 \leq 1$ のとき $q = 1$ 。

例3) $\varphi(x) = (q + px)^N$, ($q + p = 1$) 二項分布 $P(Y = k) = {}_N C_k q^{N-k} p^k$ のとき、

$m = \varphi'(1) = Np \leq 1$ のとき $q = 1$, $m = \varphi'(1) = Np > 1$ のとき $0 < q < 1$ 。

例4) ポアソン分布 $P(Y = k) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) のとき、

$$\varphi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda} \times x^k = e^{-\lambda} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\lambda x)^k}{k!} = e^{-\lambda} \times e^{\lambda x} = \exp(\lambda(x-1))$$

$m = \varphi'(1) = \lambda$ より、 $\lambda \leq 1$ のとき $q = 1$, $\lambda > 1$ のとき $0 < q < 1$ である。

離散時間マルコフ連鎖について、再帰性・非再帰性の問題は重要なテーマであるが付録(F)を参照されたい。

1. 4 指数分布と連続時間マルコフ連鎖

これまで離散時間で状態の変化(ジャンプ)が起こるマルコフ連鎖を考えてきた。この節では、状態の変化(ジャンプ)がランダムな時刻に起こる連続時間マルコフ連鎖を考える。ジャンプとジャンプの間のランダムな時間に対してマルコフ性を満たす唯一の分布は次の補助定理が示すように指数分布である。

補助定理1. 16 (指数分布の無記憶性)

T が指数分布に従う確率変数であるとき $P(T > t+s | T > s) = P(T > t)$ が成り立つ

(証明) T の分布を $P(T > t) = \exp(-\alpha t)$ とする。

$$\begin{aligned} P(T > t+s | T > s) &= \frac{P((T > t+s) \cap (T > s))}{P(T > s)} = \frac{P(T > t+s)}{P(T > s)} = \frac{\exp(-\alpha(t+s))}{\exp(-\alpha s)} \\ &= \exp(-\alpha t) \end{aligned}$$

T はある事象が起こるまでの待ち時間と考えると、すでに s の時間その事象が起こっていないとき、その後時間 t 以上待つ確率は $P(T > t) = \exp(-\alpha t)$ で与えられる。

すなわち、今まで時間 s だけ待ったという記憶を持っていない。逆に無記憶性すなわち

$P(T > t+s | T > s) = P(T > t)$ を満たす分布は $f(t) = P(T > t)$ とすると

$f(t+s) = f(t)f(s)$ を満たさなければいけないことから指数分布に限ることも示される。

補助定理1. 17

確率変数 T_1, T_2, \dots, T_n は独立でそれぞれパラメーター $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ の指数分布に従うとする。このとき、 $\min(T_1, T_2, \dots, T_n)$ はパラメーター $\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n$ の指数分布に従う。すなわち $P(\min(T_1, T_2, \dots, T_n) > t) = \exp[-(\alpha_1 + \dots + \alpha_n)t]$ 、

さらに $P(\min(T_1, T_2, \dots, T_n) = T_k) = \frac{\alpha_k}{\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n}$ が成り立つ。

(証明) T_1, T_2, \dots, T_n は独立なので

$$\begin{aligned} P(\min(T_1, T_2, \dots, T_n) > t) &= P(T_1 > t, T_2 > t, \dots, T_n > t) = P(T_1 > t)P(T_2 > t) \dots P(T_n > t) \\ &= \exp(-\alpha_1 t) \exp(-\alpha_2 t) \dots \exp(-\alpha_n t) = \exp[-(\alpha_1 + \dots + \alpha_n)t] \end{aligned}$$

$S_k = \min_{j \neq k} T_j$ とする。2つの連続で独立な確率変数が等しくなる確率は0なので

$$P(\min(T_1, T_2, \dots, T_n) = T_k) = P(T_k < S_k)、S_k \text{ はパラメーター } \beta_k = \sum_{j \neq k} \alpha_j \text{ の指数分布に従い}$$

S_k と T_k は独立に注意すると

$$P(T_k < S_k) = \iint_{0 < t < s} \alpha_k \exp(-\alpha_k t) \beta_k \exp(-\beta_k s) dt ds = \frac{\alpha_k}{\alpha_k + \beta_k} = \frac{\alpha_k}{\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n}$$

1. 5 出生死滅過程とコルモゴロフ方程式

状態空間 $S = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$ 上を左右に動く連続時間マルコフ連鎖 X_t を考える。 X_t は時刻 t における個体数を表すと考えることができる。 $X_t = i \geq 1$ ($t \geq 0$) とする。パラメーター μ_i, λ_i の二つの独立な指数分布に従うランダムな時間 D_i (death time) と B_i (birth time) を用意する。すなわち $P(D_i \geq t) = \exp(-\mu_i t)$, $P(B_i \geq t) = \exp(-\lambda_i t)$ 。 $D_i < B_i$ ならば X_{t+D_i} は時刻 $t+D_i$ に状態 $i-1$ にジャンプする。また $D_i > B_i$ ならば時刻 $t+B_i$ に状態 $i+1$ へジャンプする。 $X_t = 0$ のときは、 $\mu_0 = 0$ とし、 X_t はパラメーター λ_0 の指数分布に従う待ち時間の後、状態 1 へジャンプする。

補助定理 1. 17 より $X_t = i$ のとき、次にジャンプするまでの待ち時間はパラメーター $\mu_i + \lambda_i$ の指数分布に従う。このとき確率 $\frac{\lambda_i}{\mu_i + \lambda_i}$ で $i+1$ へジャンプし、 $\frac{\mu_i}{\mu_i + \lambda_i}$ で $i-1$ へジャンプする。このマルコフ連鎖を連続時間出生死滅過程という。

マルコフ性 : $P(X_{t+s} = j | X_s = i, X_u = k_u (0 \leq u < s)) = P(X_{t+s} = j | X_s = i)$

推移確率 : $P_t(i, j) = P(X_{t+s} = j | X_s = i)$ 時間的に一様 (s に依存しない)。

定理 1. 18 チャップマン・コルモゴロフ方程式

$$P_{t+s}(i, j) = \sum_{k \geq 0} P_t(i, k) P_s(k, j)$$

(証明)

$$\begin{aligned}
P_{t+s}(i, j) &= P(X_{t+s} = j | X_0 = i) = \sum_{k \geq 0} P(X_{t+s} = j, X_t = k | X_0 = i) \\
&= \sum_{k \geq 0} P(X_{t+s} = j | X_t = k, X_0 = i) P(X_t = k | X_0 = i) \\
&= \sum_{k \geq 0} P(X_{t+s} = j | X_t = k) P(X_t = k | X_0 = i) \\
&= \sum_{k \geq 0} P_s(k, j) P_t(i, k) = \sum_{k \geq 0} P_t(i, k) P_s(k, j)
\end{aligned}$$

定理 1. 19

出生率 $\{\lambda_i\}$ 、死亡率 $\{\mu_i\}$ の出生死滅過程の推移確率は次の性質を持つ。

$$(1) \quad P_h(i, i+1) = \lambda_i h + o(h), \quad P_h(i, i-1) = \mu_i h + o(h), \quad P_h(i, i) = 1 - (\lambda_i + \mu_i)h + o(h)$$

$$P_0(i, j) = \delta_{i,j} \quad \text{特に } \lim_{h \rightarrow 0} P_h(i, i) = 1$$

(2) 出生死滅過程 X_t がジャンプする時刻を $\tau_1 < \tau_2 < \tau_3 < \dots < \tau_n <$ とする。

確率変数 $\tau_1, \tau_2 - \tau_1, \tau_3 - \tau_2, \dots, \tau_n - \tau_{n-1}, \dots$ は独立である。 $n-1$ 番目のジャンプ後

$X_{\tau_{n-1}} = i$ ならば、 $\tau_n - \tau_{n-1}$ はパラメータ $\lambda_i + \mu_i$ の指数分布に従う。

$$P(X_{\tau_n} = i+1 | X_{\tau_{n-1}} = i) = \frac{\lambda_i}{\lambda_i + \mu_i}, \quad P(X_{\tau_n} = i-1 | X_{\tau_{n-1}} = i) = \frac{\mu_i}{\lambda_i + \mu_i}$$

ジャンプ時刻 $\tau_1 < \tau_2 < \tau_3 < \dots < \tau_n <$ のような確率的時刻をマルコフ時刻という（詳しくは付録(I) を参照）。また確率 $\{\frac{\lambda_i}{\lambda_i + \mu_i}, \frac{\mu_i}{\lambda_i + \mu_i}; i = 0, 1, 2, \dots\}$ より、この確率で状態空間 $S = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$ 上を左右に 1 ステップずつ動く離散時間マルコフ連鎖が導かれる。
このマルコフ連鎖を連続時間マルコフ連鎖 X_t のジャンプ過程という。

定理 1. 20 Kolmogorov の後退方程式

推移確率 $\{P_t(i, j); i, j \in S\}$ は次の方程式を満たす。

$$\frac{d}{dt} P_t(i, j) = \mu_i P_t(i-1, j) + \lambda_i P_t(i+1, j) - (\lambda_i + \mu_i) P_t(i, j)$$

ただし $\mu_0 = 0$, $P_0(i, j) = \delta_{i,j}$

(証明) チャップマン・コルモゴロフ方程式より $P_{t+h}(i, j) = \sum_{k=0}^{\infty} P_h(i, k) P_t(k, j)$ 。

$i \geq 1$ を固定し、 $I = \{i-1, i, i+1\}$ とする。このとき、

$$\begin{aligned}\sum_{k \in I} P_h(i, k) P_t(k, j) &\leq \sum_{k \in I} P_h(i, k) = 1 - \sum_{k \in I} P_h(i, k) \\ &= 1 - \{1 - (\lambda_i + \mu_i)h + o(h) + \lambda_i h + o(h) + \mu_i h + o(h)\} = o(h)\end{aligned}$$

以上より $\sum_{k \in I} P_h(i, k) P_t(k, j) = o(h)$ 。

$$\sum_{k \in I} P_h(i, k) P_t(k, j) = \mu_i h P_t(i-1, j) + \{1 - (\lambda_i + \mu_i)h\} P_t(i, j) + \lambda_i h P_t(i+1, j) + o(h)$$

これより

$$P_{t+h}(i, j) - P_t(i, j) = \mu_i h P_t(i-1, j) - (\lambda_i + \mu_i)h P_t(i, j) + \lambda_i h P_t(i+1, j) + o(h)$$

両辺を h で割り $h \rightarrow 0$ とすると、Kolmogorov の後退方程式を得る。

後退方程式は初期時刻 $t = 0$ と h の間の変化を考えることにより導かれたが、終端時刻 t と $t + h$ の間の変化に着目することにより、Kolmogorov の前進方程式を得る。

定理 1. 21 Kolmogorov の前進方程式

$$\frac{d}{dt} P_t(i, j) = \mu_{j+1} P_t(i, j+1) + \lambda_{j-1} P_t(i, j-1) - (\lambda_j + \mu_j) P_t(i, j) \quad i \geq 0, j \geq 1$$

$$\text{ただし } j = 0 \text{ のときは、} \frac{d}{dt} P_t(i, 0) = \mu_1 P_t(i, 1) - \lambda_0 P_t(i, 0)$$

(証明) $i \geq 0, j \geq 1$ のとき次の等式が成り立つことより容易に導かれる。

$$P_{t+h}(i, j) = \lambda_{j-1} h P_t(i, j-1) + \mu_{j+1} h P_t(i, j+1) + \{1 - (\lambda_i + \mu_i)h\} P_t(i, j) + o(h)$$

1. 6 ポアソン過程および有限マルコフ過程

(1) ポアソン過程

出生死滅過程で $\mu_n = 0$ ($n \geq 0$) と置いたとき純出生過程と言う。さらには出生率が一定で $\lambda_n = \lambda$ ($n \geq 0$) としたものをポアソン過程 (Poisson Process) と言う。

ポアソン過程 X_t ($t \geq 0$) の推移確率を $P_t(i, j)$, ($i, j \geq 0$) とすると、次の Kolmogorov 後退方程式、及び前進方程式が成り立つ。

$$\text{後退方程式: } \frac{d}{dt} P_t(i, j) = \lambda \{P_t(i+1, j) - P_t(i, j)\}, \quad P_0(i, j) = \delta_{i,j}.$$

$$\text{前進方程式: } i \geq 0, j \geq 1 \text{ のとき} \quad \frac{d}{dt} P_t(i, j) = \lambda \{P_t(i, j-1) - P_t(i, j)\}$$

$$\frac{d}{dt} P_t(i, 0) = -\lambda P_t(i, 0), \quad P_0(i, j) = \delta_{i,j}$$

初期条件を $P_0(0, j) = \delta_{0,j}$ として状態 0 から出発するポアソン過程を考え、簡単のため

$P_t(0, k) = P_t(k)$ と書くことにすると、前進方程式より

$$\frac{d}{dt}P_t(0) = -\lambda P_t(0), \quad P_0(0) = 1 \quad \dots\dots\dots(1)$$

$$k \geq 1 のとき \frac{d}{dt}P_t(k) = \lambda P_t(k-1) - \lambda P_t(k), \quad P_0(k) = 0 \dots\dots\dots(2)$$

$P_t(k) = \exp(-\lambda t) Q_t(k) \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$ とすると (1)、(2) より

$$\frac{d}{dt}Q_t(0) = 0, \quad Q_0(0) = 1; \quad \frac{d}{dt}Q_t(k) = \lambda Q_t(k-1), \quad Q_0(k) = 0, \quad k \geq 1$$

これより $Q_t(0) = 1, \quad Q_t(k) = \frac{(\lambda t)^k}{k!}$ 、よって $P_t(k) = \frac{(\lambda t)^k}{k!} \exp(-\lambda t)$ ポアソン分布。

ポアソン過程は時間的、空間的に一様なので一般に $P_t(i, j) = \frac{(\lambda t)^{j-i}}{(j-i)!} \exp(-\lambda t)$ また

$$P(X_t - X_s = k) = \frac{\{\lambda(t-s)\}^k}{k!} \exp(-\lambda(t-s)), \quad E[X_t] = \lambda t \quad \text{である。}$$

「参考」二項分布とポアソン分布

二項分布 $B(n, p)$ からの極限としてポアソン分布が導かれる。

二項分布 $P(k) = {}_n C_k p^k q^{n-k}, p+q=1$ において $np = \lambda$ (一定) の条件の下で、 $n \rightarrow \infty$ ($p \rightarrow 0$) の極限をとる。

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} P(k) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n(n-1)(n-2)\dots(n-k+1)}{k!} \left(\frac{\lambda}{n}\right)^k \left(1 - \frac{\lambda}{n}\right)^{n-k} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\lambda^k}{k!} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \left(1 - \frac{2}{n}\right) \dots \left(1 - \frac{k-1}{n}\right) \left(1 - \frac{\lambda}{n}\right)^n \left(1 - \frac{\lambda}{n}\right)^{-k} = \frac{\lambda^k}{k!} \exp(-\lambda) \end{aligned}$$

ポアソン過程 X_t は独立増分を持つ。すなわち、 $0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n$ のとき、確率変数

$X_{t_2} - X_{t_1}, X_{t_3} - X_{t_2}, \dots, X_{t_n} - X_{t_{n-1}}$ は独立である。このような独立増分を持つ確率過程を加法過程という。

(2) 有限状態マルコフ過程

状態数が有限の場合は行列を使って遷移確率を求めることができる。状態空間を $S = \{1, 2, \dots, r\}$ とし S 上の連続時間マルコフ連鎖を考える。

状態空間 S 上の連続時間マルコフ連鎖 X_t の推移確率を $\{P_t(k, j); k, j \in S\}$ とする。

$$\begin{cases} P_h(k, j) = q_{k,j} h + o(h) & k \neq j \\ P_h(k, k) = 1 - (\sum_{j \neq k} q_{k,j}) h + o(h) & \end{cases} \quad \text{を満たすとき、コルモゴロフ方程式は次のようになる。}$$

$Q = (q_{k,j}), \quad P(t) = (P_t(k, j))$ とすると (Q を生成行列と言う)。

$$\frac{d}{dt}P(t) = QP(t) = P(t)Q \quad P(0) = E(\text{単位行列}) \text{、解は } P(t) = \exp(tQ) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(tQ)^n$$

で与えられる。

(例) $S = \{1, 2\}$ 、 $q_{1,1} = -1$, $q_{1,2} = 1$, $q_{2,1} = 2$, $q_{2,2} = -2$ とする。

生成行列 $Q = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 2 & -2 \end{pmatrix}$ 、このとき $Q^n = (-3)^{n-1} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 2 & -2 \end{pmatrix}$ 。これより

$$P(t) = \exp(tQ) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \times \frac{(-3t)^n}{n!} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 2 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix} + \exp(-3t) \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{2}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

たとえば、 $P_t(1,1) = \frac{2}{3} + \frac{1}{3}\exp(-3t)$, $P_t(1,2) = \frac{1}{3} - \frac{1}{3}\exp(-3t)$ 等となる。

連続時間マルコフ連鎖について、次の式を満たす $\Pi = (\pi(k); k \in S)$ を定常分布という

$$\sum_{k \in S} \pi(k) = 1, \quad \sum_{j \in S} \pi(j)P_t(j,k) = \pi(k)。また、連続時間マルコフ連鎖には周期性の問題は$$

存在しない。

(3) 複合ポアソン過程と有限状態マルコフ過程

$N(t)$ をパラメーター λ のポアソン過程、すなわち $P(N(t) = n) = \frac{(\lambda t)^n}{n!} \exp(-\lambda t)$

とし、 X_n を状態空間 $S = \{1, 2, \dots, r\}$ 上の離散時間マルコフ連鎖で推移確率が

推移確率行列 $P = (p_{kj})$, $p_{kj} = P(X_{n+1} = j | X_n = k)$ で与えられるものとする。

高次の推移確率は $P(X_n = j | X_0 = k) = (P^n)_{kj}$ であり、ポアソン過程 $N(t)$ と X_n は独立

とする。このとき、 $N(t) = n$ ならば $X(t) = X_{N(t)} = X_n$ によって連続時間マルコフ連鎖

$X(t)$ を定義すると、その推移確率は

$$\begin{aligned} P_{kj}(t) &= P(X(t) = j | X(0) = k) = \sum_{n=0}^{\infty} P(X_n = j, N(t) = n | X(0) = k) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} P(N(t) = n) P(X_n = j | X(0) = k) \end{aligned}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda t)^n}{n!} \exp(-\lambda t) (P^n)_{kj} = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda t P)^n}{n!} \exp(-\lambda t) \right)_{kj}$$

$$= (\exp(\lambda t(P-E))_{kj} = (\exp(tQ))_{kj}; \text{ ただし、 } Q = \lambda(P-E).$$

$X(t)$ の推移確率行列を $P(t) = (P_{kj}(t))$ とすると $P(t) = \exp(tQ)$ となる。

これを用いてコルモゴロフの後退方程式を求めてみると、

$$\frac{d}{dt} P(t) = QP(t) = P(t)Q, \quad Q = \lambda(P-E) \text{ は 生成行列と呼ばれる。}$$

$$Q = \lambda(P-E) = (\lambda(p_{kj} - \delta_{kj})), \quad q_{kj} = \lambda(p_{kj} - \delta_{kj}) \text{ と置く。}$$

$$k \neq j \Rightarrow q_{kj} = \lambda p_{kj} \geq 0$$

$$k = j \Rightarrow q_{kk} = \lambda(p_{kj} - 1) \leq 0, \quad \sum_j q_{kj} = \lambda(\sum_j p_{kj} - 1) = 0$$

すなわち、前節の有限状態マルコフ過程と同じ方程式が得られた。

逆に、 $\frac{d}{dt} P(t) = QP(t) = P(t)Q, \quad P(t) = \exp(tQ)$ が与えられたとき、 $Q = \lambda(P-E)$ の

関係式を用いて有限状態マルコフ過程から $P = E + \frac{1}{\lambda} Q$ により推移確率行列 P を求め、複

合ポアソン過程を構成することができる。ただし、生起パラメーター λ に依存して P は決まるが、これはポアソン過程の次の性質により、 λ の違いは解釈できる。

定理 1. 22

$X(t)$ を生起パラメーター λ のポアソン過程、 $Y(t)$ を $\text{Binomial}(X(t), p); 0 < p < 1$

すなわち、 $P(Y(t) = k) = \sum_{n=k}^{\infty} P(X(t) = n) \times {}_n C_k p^k q^{n-k}$ によって定義する。 $Y(t)$ はポアソン

過程 $X(t)$ の生起のたびに確率 p で振るいにかけたプロセスである。このとき $Y(t)$ は生起パラメーター λp のポアソン過程になる。この操作を *thinning* (間引き) という。

(証明)

$$P(Y(t) = k) = \sum_{n=k}^{\infty} P(X(t) = n) \times {}_n C_k p^k q^{n-k} = \sum_{n=k}^{\infty} \frac{(\lambda t)^n}{n!} \exp(-\lambda t) \times \frac{n!}{k!(n-k)!} p^k q^{n-k}$$

$$= \exp(-\lambda t) \frac{(\lambda t)^k p^k}{k!} \sum_{n=k}^{\infty} \frac{(\lambda t)^{n-k}}{(n-k)!} q^{n-k} = \frac{(\lambda p t)^k}{k!} \exp(-\lambda t) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(\lambda q t)^j}{j!}$$

$$= \frac{(\lambda p t)^k}{k!} \exp(-\lambda t) \exp(\lambda q t) = \frac{(\lambda p t)^k}{k!} \exp(-\lambda(1-q)t) = \frac{(\lambda p t)^k}{k!} \exp(-\lambda p t)$$