マルコフ連鎖における後退遷移行列、ベイズ定理、局所平衡

日大生産工　○篠原正明
情報システム研究所　篠原健

1．はじめに

(前進方向)の遷移確率行列 P が与えられると、適当な条件下では $x = P^T x$ を満たす定常状態ベクトル x が得られる。この x と P から、後退方向の $x = \mathrm{Q}^T x$ を満たす逆推定確率行列 Q をベイズ定理に基づき形成できることを示す。一般に P も Q も遷移枝に関して局所フロー平衡を満たさないが、新たな確率行列 $\mathrm{R} = (P + \mathrm{Q})/2$ は常に局所平衡(local balance)を満足することを示す。

2．前進、後退方向のマルコフ連鎖の理論

前進方向漸化式 $x(k) = P^T x(k-1)$ で、$x(k) = x(k-1) = x$ と置き、$\sum x_i = 1$ の正規化条件下で $x = P^T x$ を解くことにより、確率行列 P の下での定常状態確率ベクトル x_0 を得る。次に、「$x_i P_{ij} = x_j \mathrm{Q}_{ji}$」を満足する Q_{ji} を計算し、Q_{ji} を (j,i) 要素とする行列 Q を形成する。この Q も $\sum_i \mathrm{Q}_{ji} = 1$ を満たし、確率行列である。又、「$x_i P_{ij} = x_j \mathrm{Q}_{ji}$」は、連続する２つの定常状態空間を原因状態空間と結果状態空間とした時に、ベイズ定理に基づき Q_{ji} を計算することに相当するので、Q を逆推定確率行列とも呼ぶ。ここで、この Q は、本来は $x(k-1) = \mathrm{Q}^T x(k)$ を満たすが、$x(k) = x(k-1) = x$ とすれば、$x = \mathrm{Q}^T x$ と P と形式的には同じ方程式を満たし、従って同じ定常状態確率ベクトル x_0 を持つ。

(注意１)　$P\mathrm{Q} = I$ あるいは $\mathrm{Q}P = I$ は成立しない。

(注意２)　P と Q の凸結合により得られる任意の確率行列 X の定常状態確率ベクトルは x_0 に同じ。

(注意３)　Q よりベイズ定理に基づき、逆推定確率行列を作れば、P となる。

3．マルコフ連鎖における局所平衡

遷移枝 (i, j) に注目した時に、$i \rightarrow j$ 方向の枝フロー $f_{ij} = x_i P_{ij}$ と $j \rightarrow i$ 方向の枝フロー $f_{ji} = x_j P_{ji}$ がすべての枝において一致する場合に、局所平衡(ローカルバランス)が成立するという。このようなマルコフ連鎖では、１つの枝のみに注目して通常では成立しないフロー平衡式($x_i P_{ij} = x_j P_{ji}$)が成立するため、様々な特徴的な性質が成立することが知られている。通常、遷移確率行列 P が与えられても、それが初めから局所平衡を満足するのは特別な場合である。しかし、P と x より Q を作ると、新しい確率行列 $\mathrm{R} = (P + \mathrm{Q})/2$ は常に局所平衡条件を満足する。

(注意４)　任意の局所平衡条件を満たさない確率行列 P に対して、ベイズ定理に基づき Q を作り、さらに P と Q を使って、$\mathrm{R} = (P + \mathrm{Q})/2$ を作れば、それは必ず局所平衡条件を満たす……という主張である。局所平衡確率行列の生成法であるが、任意の確率行列 Y がベイズ定理の関係にある P と Q に等分割できれば、それは局所平衡条件を満たすという判定法でもある。

Backward Transition Matrix, Bayes Theorem, and Local Balance in Markov Chain

Masaaki SHINOHARA and Ken SHINOHARA

４．数値例

４.１　２状態マルコフ連鎖の例

遷移確率行列 P 、定常状態確率ベクトル x は(１)、(２)式で与えられる。

$$P=\begin{pmatrix}1-p & p\\ q & 1-q\end{pmatrix} \qquad (1)$$

$$x=\begin{pmatrix}\dfrac{q}{p+q}\\ \dfrac{p}{p+q}\end{pmatrix} \qquad (2)$$

ベイズ定理により逆推定確率行列 Q は(３)式で与えられる。

$$\mathrm{Q}=\begin{pmatrix}1-p & p\\ q & 1-q\end{pmatrix} \qquad (3)$$

２状態では元来、局所平衡を満たしているので、P＝Q となる。

４.２　３状態マルコフ連鎖の例

P が(４)式で与えられると、x は(５)式、さらにベイズ定理により Q は(６)式と計算される。

$$P=\begin{pmatrix}0.6 & 0.4 & 0\\ 0.5 & 0.2 & 0.3\\ 0.9 & 0 & 0.1\end{pmatrix} \qquad (4)$$

$$x=\begin{pmatrix}0.6\\ 0.3\\ 0.1\end{pmatrix} \qquad (5)$$

$$\mathrm{Q}=\begin{pmatrix}0.6 & 0.25 & 0.15\\ 0.8 & 0.2 & 0\\ 0 & 0.9 & 0.1\end{pmatrix} \qquad (6)$$

さて、Q も(５)式と同じ定常状態ベクトルを持つことは容易に確認できる。又、$\mathrm{R}=(P+\mathrm{Q})/2$ の(７)式も同じ定常状態ベクトルを持つ。

$$\mathrm{R}=\begin{pmatrix}0.6 & 0.325 & 0.075\\ 0.65 & 0.2 & 0.15\\ 0.45 & 0.45 & 0.1\end{pmatrix} \qquad (7)$$

又、以下に示すように P と Q では枝フロー局所平衡が成立しないが、R では成立している。例えば、(１,２)間に注目すると、P において $f_{12}=x_1p_{12}=0.24$，$f_{21}=x_2p_{21}=0.15$ 、 Q において $f_{12}=x_1q_{12}=0.15$，$f_{21}=x_2q_{21}=0.24$、R においては $f_{12}=x_1r_{12}=0.195$ ，$f_{21}=x_2r_{21}=0.195$ であり、 R についてのみ $f_{12}=f_{21}$ が成立している。

又、P と Q の適当な凸結合により得られた(８)式の $\mathrm{S}(=0.6P+0.4\mathrm{Q})$ も、(５)式と同じ定常状態確率を持つ。

$$\mathrm{S}=0.6P+0.4\mathrm{Q}$$

$$=\begin{pmatrix}0.6 & 0.34 & 0.06\\ 0.62 & 0.2 & 0.18\\ 0.54 & 0.36 & 0.1\end{pmatrix} \qquad (8)$$

さらに、$P\ \mathrm{Q}$((９)式)あるいは $\mathrm{Q}\ P$ は単位行列にならず、いずれも(５)式と同じ定常状態確率を持つ。

$$P\mathrm{Q}=\begin{pmatrix}0.68 & 0.23 & 0.09\\ 0.46 & 0.435 & 0.105\\ 0.54 & 0.315 & 0.145\end{pmatrix} \qquad (9)$$

５．おわりに

平衡条件については、大域(global)、局所(local)、詳細(detailed)、部分(partial)などの修飾語が頭につき、確率フローの平衡を特徴付けている。本論文では、その中でも「遷移枝」に注目して平衡が成立するクラスを局所平衡と呼んだ（正確には、枝局所平衡、枝詳細平衡、等と呼ぶべきかもしれない)。 P と Q がベイズ定理の逆推定の関係にあること、$\mathrm{R}=(P+\mathrm{Q})/2$ が枝局所平衡を満たすこと、P と Q の任意の凸結合も同じ x を持つこと、等を数値例と共に示した。