線形連立方程式の正規化解法とマルコフ連鎖への応用

日本大学　　　篠原　正明
情報システム研究所　　篠原　健

1．はじめに

遷移確率行列Pを持つマルコフ連鎖の定常状態確率ベクトルxは、線形連立方程式系$\{x = P^T x, \sum x_i = 1\}$を解くことにより求まる。これを解く方法として、私個人的に多用している正規化法を説明(提案)し、さらに一般の連立方程式へ拡張する。最後に、一般化正規化条件$a^T x = 1$が付加されたマルコフ連鎖の意味付けについて考察する。

2．マルコフ連鎖の正規化解法

マルコフ連鎖の正規化解法とは、$\{x = P^T x, \sum x_i = 1\}$において、仮に$x_1 = 1$と置き、$x = P^T x$の適当な n-1 本の線形連立方程式を何らかの方法で解き、その解を、$x_2, x_3, \cdots, x_n$とした時に、(1)式により正規化することにより、解を求める方法である。

$$x_i \leftarrow x_i / \sum x_j \qquad (i = 1, \cdots, n) \quad (1)$$

この方法の利点は、n変数方程式が(n－1)変数方程式の求解に帰着される点である。n=3、n=4 程度のマルコフ連鎖の定常状態確率ベクトルの手計算求解では非常に有効である。

例1

遷移確率行列Pが(2)式で与えられると、平衡方程式は(3)－(5)式である。

$$P = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.4 & 0 \\ 0.5 & 0.2 & 0.3 \\ 0.9 & 0 & 0.1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$x_1 = 0.6x_1 + 0.5x_2 + 0.9x_3 \quad (3)$$

$$x_2 = 0.4x_1 + 0.2x_2 \quad (4)$$

$$x_3 = \qquad + 0.3x_2 + 0.1x_3 \quad (5)$$

疎な(4)式と(5)式において、x_1=1 を代入すると簡単に、

$x_2 = 0.5, x_3 = 1/6$を得る。

x_1, x_2, x_3を総和して 1 になるように正規化すると、$x_1 = 0.6, x_2 = 0.3, x_3 = 0.1$を得る。

すなわち、(3)-(5)式において、密結合な変数を選んで 1 とでも置き、疎な 2 本の方程式に代入して、それを残った変数で解けばよい。経験上、手計算では大幅に手間が減少する。

2 章の正規化法がどこまで一般化・拡張できるかを次章で試みる。まず正当性は問わないで、形式的にアルゴリズムを拡張してみよう。

3. 一般の連立方程式への拡張の可能性検討

n 変数連立方程式系（線形に限定されない）において、少なくとも 1 方程式において以下の非同次線形方程式の存在を仮定しよう。

$$a_1 x_1 + a_2 x_2 + \cdots + a_n x_n = b (b \neq 0) \quad (6)$$

すると、拡張正規化法の手続きは以下の通りである。

A Normalization Method to Solve a Set of Linear Equations and its Application to Markov Chain

Masaaki SHINOHARA and Ken SHINOHARA

ステップ１：例えば、$x_1=1$と仮に置く。

ステップ２：$a^T x=1$を除いた（n-1）方程式系を何らかの方法で解き、その解を$x_2, x_3, \cdots, x_n$とする。

ステップ３：

$$x_i \leftarrow bx_i \Big/ \sum a_j x_j (i=1,\cdots,n) \quad (7)$$

２章と同様に、n変数方程式の求解が（n-1）変数方程式の求解に帰着されるわけだが、この拡張正規化法の正当性は？

残念ながら、この拡張正規化法は必ずしも正解を与えないことは、簡単な次の例２より判明する。

例２

(8)-(10)式の線形連立方程式を考える。

$$x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 10 \quad (8)$$

$$2x_1 + 3x_2 + 4x_3 = 16 \quad (9)$$

$$x_1 - x_2 + x_3 = 2 \quad (10)$$

$x_1=1$とおいて、（９）と（１０）をとくと

$x_2=\frac{10}{7}, x_3=\frac{17}{7}$となるが、（８）式で正規化しても、正解を得られない。

この正解を得られな理由は、残った（n-１）次方程式系（９）、（10）が非同次であるからであり、それらが同次形ならば、拡張正規化法が正常動作することを次の例３より確認する。

例３

(11)-(13)式の線形連立方程式を考える。

$$x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 10 \quad (11)$$

$$x_1 - x_2 - x_3 = 0 \quad (12)$$

$$x_1 - 2x_2 + x_3 = 0 \quad (13)$$

$x_1=1$とおいて、(12)、(13)を解くと

$x_2=\frac{2}{3}, x_3=\frac{1}{3}$を得る。(11)式にもとづき正規化すると、

$$x_1 \leftarrow \frac{10\times 1}{1+\frac{4}{3}+\frac{3}{3}} = 3 \quad (14)$$

$$x_2 \leftarrow \frac{10\times \frac{2}{3}}{1+\frac{4}{3}+\frac{3}{3}} = 2 \quad (15)$$

$$x_3 \leftarrow \frac{10\times \frac{1}{3}}{1+\frac{4}{3}+\frac{3}{3}} = 1 \quad (16)$$

以上に示すように正解を得る。

4.　マルコフ連鎖における一般化正規化条件

線形連立方程式系$\{x=P^T x, \sum a_i x_i = 1\}$（$a_i > 0$を仮定）で定義されるマルコフ連鎖を考える。

数値計算的には、$Ax=b$と変形することにより、求解できるが、マルコフ連鎖としての意味を考察する。

$$y_i = a_i x_i \quad (17)$$

(17)式の変数変換を行うと、次の線形連立方程式を得る。

$$y = Q^T y \quad (18)$$

$$\sum y_i = 1 \quad (19)$$

但し、　$Q=\{q_{ij}\}, q_{ij} = p_{ij}\frac{a_j}{a_i}$

ここで、Ｑは一般には確率行列の条件を満たさないが、$\lim Q^k$はどのような振舞をするかを次の例４で観察する。

例４

(2)式のＰを持つマルコフ連鎖に

$x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 1$の正規化条件を付加する。線形連立方程式としての解は $x_1 = 0.4, x_2 = 0.2, x_3 = 0.066667$
$(y_1 = 0.4, y_2 = 0.4, y_3 = 0.2)$
Ｑは(20)式で与えられる。

$$Q = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.8 & 0 \\ 0.25 & 0.2 & 0.45 \\ 0.3 & 0 & 0.1 \end{pmatrix} \tag{20}$$

ＰもＱも４乗程度で以下の値に収束する。

$$P^4 = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.3 & 0.1 \\ 0.6 & 0.3 & 0.1 \\ 0.6 & 0.3 & 0.1 \end{pmatrix} \tag{21}$$

$$Q^4 = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.6 & 0.3 \\ 0.3 & 0.3 & 0.15 \\ 0.2 & 0.2 & 0.1 \end{pmatrix} \tag{22}$$

Ｑは行一様ではないが収束し、対角要素は 0.6、0.3、0.1 であり、P^k の収束値と一致する。

5．線形連立方程式に対する正規化法による再帰解法

ｎ変数非同次線形連立方程式 $A_{(n)}x_{(n)} = b_{(n)} (b_{(n)} \neq 0)$ において、右辺定数ベクトルｂは、適当な等価変形を行えば、$b_{(n)}^T = (1,0,0,\cdots,0)$ と変形できる。そうすれば、$x_1 = 1$と仮に置いた残りの（n-1）変数の非同次線形連立方程式 $A_{(n-1)}x_{(n-1)} = b_{(n-1)} (\neq 0)$ の求解に帰着できる。同様にこれも適当な代入操作により、$b_{(n-1)}^T = (1,0,0,\cdots,0)$ と変形でき、$x_2 = 1$と仮に置いた(n-2)変数の非同次線形連立方程式 $A_{(n-2)}x_{(n-2)} = b_{(n-2)} (\neq 0)$ の求解に帰着できる。すなわち正規化法による再帰解法が可能となる。このアルゴリズムを例 2 の線形連立方程式(8)-(10)に適用し、以下に手続きを説明する。

例５
以下に例 2 の方程式を再載する。

$$x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 10 \tag{23}$$
$$2x_1 + 3x_2 + 4x_3 = 16 \tag{24}$$
$$x_1 - x_2 + x_3 = 2 \tag{25}$$

右辺定数ベクトルを $b^T = (1,0,0)$ に変形するため、以下の線形変換を行う。

(23)はそのまま→(26)
－5×(23)+3×(24)+(25)→(26)
(23)－(24)+3×(25)→(27)

$$x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 10 \tag{26}$$
$$x_1 - x_2 - x_3 = 0 \tag{27}$$
$$x_1 - 2x_2 + x_3 = 0 \tag{28}$$

ここで、(26)式の右辺定数が１でなく 10 であるが、本質的でない。又、例３に一致させるための変換を行ったが、これも本質的でなく $b^T = (1,0,0)$ の形式なら階数を保持する範囲で任意である。

$x_1 = 1$と仮に置いて(27)、(28)を解くと、次の２元連立方程式を得る。

$$x_2 + x_3 = 1 \tag{29}$$
$$2x_2 - x_3 = 1 \tag{30}$$

右辺定数ベクトルを $b^T = (1,0)$ に変形するため、以下の線形変換を行う。
(29)はそのまま→(31)
(29)－(30)→(32)

$$x_2 + x_3 = 1 \tag{30}$$
$$-x_2 + 2x_3 = 0 \tag{31}$$

$x_2 = 1$と仮に置いて、(31)を解くと、(31)は次の一元（連立）方程式となる。

$$-1 + 2x_3 = 0 \tag{32}$$
$$\therefore x_3 = \frac{1}{2} \tag{33}$$

(30)で正規化すると、途中解 x_2 (34)、 x_3 (35)を得る。

$$x_2 = \frac{2}{3} = \frac{1}{1+\frac{1}{2}} \quad (34)$$

$$x_3 = \frac{1}{3} = \frac{\frac{1}{2}}{1+\frac{1}{2}} \quad (35)$$

次に、途中解 $x_2 = \frac{2}{3}, x_3 = \frac{1}{3}$ を(26)で正規化すると、最終解 x_1 (37)、 x_2 (38)、 x_3 (39)を得る。

$$x_1 \leftarrow \frac{10\times 1}{1+\frac{4}{3}+\frac{3}{3}} = 3 \quad (37)$$

$$x_2 \leftarrow \frac{10\times \frac{2}{3}}{1+\frac{4}{3}+\frac{3}{3}} = 2 \quad (38)$$

$$x_3 \leftarrow \frac{10\times \frac{1}{3}}{1+\frac{4}{3}+\frac{3}{3}} = 1 \quad (39)$$

これらは、線形連立方程式(23)-(25)の正解である。

6. 解法アルゴリズムの分類

線形連立方程式あるいは連立一次方程式の求解アルゴリズムの分類法は、立場により若干の差異は存在するものの、以下がその代表例と思われる。

・①直接法と反復法〔1〕

・②有理解法と反復解法〔2〕

・③消去法と反復法と共役勾配法〔3〕

提案した新解法アルゴリズムは、①と②の分類に従えば、それぞれ、①では直接法、②では有理解法に属すると言える。③の分類法では、どこにも属さない。

7. 解法アルゴリズムの手間評価

直接法あるいは有理解法の代表的な既存解法として、<u>**Gauss-Jordanの掃き出し法**</u>をとりあげ、新解法アルゴリズムと比較して、ｎ変数の線形連立方程式を解く際の足算、引算、掛算、割算の演算回数をおおまかに評価すると以下の結果を得る。

掃き出し法：引算 n(n-1)(n+1)/3、掛算 n(n-1)(n+1)/3、割算 n(n+1)/2

新解法アルゴリズム：足算 n(n-1)/2、引算 n(n-1)(n+1)/3、掛算 n(n-1)(n+1)/3＋n(n+1)/2、割算 n(n+1)

ただし、 $\sum_{k=1}^{n} k^2 - k$ ＝ n(n-1)(n+1)/3 、

$\sum_{k=1}^{n} k$ ＝n(n+1)/2 である。

これより、掃き出し法と比較すると、新解法アルゴリズムの方が、わずかに、正規化作業の分だけ多いことがわかる。正規化作業以外の手間は、同じである。

8. おわりに

提案した正規化法による再帰解法の既存手法との比較、 $b^T = (1,0,0,\cdots,0)$ の形式をとる線形系の双対性の考察、などは今後の課題である。提案した正規化法による線形連立方程式の再帰解法が新解法アルゴリズムであることが判明すれば、特定応用分野、非線形系、他の双演算系、など関連分野への波及効果が期待できる。

又、マルコフ連鎖における一般化正規化条件の意味付けについては、その理論基盤の解明と共に今後の課題である。

参考文献

〔1〕 大野豊、磯田和夫：数値計算ハンドブック、オーム社（1990）

〔2〕 伊理正夫：線形代数Ⅱ、岩波書店（1997）

〔3〕 森正武、他：線形計算、岩波書店（1997）