Chapter Seven : Markov Chains and Random Walks
発表レジュメ

當眞 ジェイソン翔

2018 年 5 月 21 日

この章では、時間変化していく事象をモデリングするための枠組みとして Markov 連鎖を導入する。まずはじめに Markov 連鎖を定義し、充足可能性問題に対する乱択アルゴリズムの解析に使用できることを見ていく。次に Markov 連鎖の状態の分類をし、定常分布へ収束する条件を確認する。次に、グラフの被覆時間に関する上界を与え、s-t 連結性を確かめる乱択アルゴリズムを示す。

1 Markov 連鎖の定義とその表現方法

定義 1.1. (確率過程)

$(\Omega, \mathcal{F}, \Pr)$: 確率空間、$(S, \mathcal{S})$: 可測空間、T : 全順序集合 とする。

このとき、時刻 T で添字付けられる、状態空間 S に値を取る確率過程 X とは

$$X : T \times \Omega \to S$$

であり、${}^{\forall} t \in T$ に対して $X(t, \cdot) = X_t$ が Ω 上の確率変数となるものである。

定義 1.2. (離散空間、離散時間確率過程)

状態空間 S が可算集合である時、確率過程 $\boldsymbol{X}$ を離散空間上の確率過程という。状態空間 S が有限集合である時、確率過程 $\boldsymbol{X}$ は有限であるという。

時刻集合 T が可算集合である場合、$\boldsymbol{X}$ を離散時間確率過程という。X_t がとる値を時刻 t での状態という。

定義 1.3. (遷移確率行列)

$(n+1) \times (n+1)$ 行列 $P = (p)_{ij}$ が遷移確率行列 $\overset{\triangle}{\iff}$ ${}^{\forall} i, j\ (0 \le i, j \le n),\ p_{ij} \ge 0$ かつ $\displaystyle\sum_{j=0}^{n} p_{ij} = 1$

定義 1.4. (Markov 連鎖)

$\boldsymbol{X} = \{X_0, X_1, X_2, \cdots\}$ を離散空間上の離散時間確率過程とする。

$$\Pr(X_t = a_t | X_{t-1} = a_{t-1}, X_{t-1} = a_{t-2}, \cdots, X_0 = a_0) = \Pr(X_t = a_t | X_{t-1} = a_{t-1}) = P_{a_{t-1}, a_t}$$

が任意の $t > 0, a_0, \cdots, a_t \in S$ で成立するとき、$\boldsymbol{X}$ を **Markov** 連鎖と定義する。[*1] ここで、P は (i, j) 成分が $\Pr(X_t = j | X_{t-1} = i)$ である遷移確率行列である。

注意 1.5.

$\boldsymbol{X}$ は離散空間上の確率過程なので、取りうる状態を $\{0, 1, 2, \cdots, n\}$ または $\mathbb{N}$ に限定しても一般性を失わない。

[*1] 正確には、これは時斉次 Markov 連鎖 (遷移確率行列が時間変化しない Markov 連鎖) であるが、この章では時斉次 Markov 連鎖でのみ議論をしていく。

遷移確率行列を用いると、未来の時刻での分布を簡単に計算できる。

状態空間が $\{0, 1, 2, \cdots, n\}$ で、遷移確率行列が P で与えられる Markov 連鎖を考える。$\boldsymbol{p}(t)$ を、第 i 成分が $\Pr(X_t = i)$ である $n+1$ 次元の行ベクトルであるとすると、

$$p_i(t+1) = \sum_{j=0}^{n} p_j(t) P_{j,i}$$

が成り立つ。これを成分ごとにまとめると

$$\boldsymbol{p}(t+1) = \boldsymbol{p}(t)P$$

と書ける。

また、同じ Markov 過程で、状態 i からちょうど m ステップ後に状態 j に遷移する確率を $P^m_{i,j} := \Pr(X_{t+m} = j | X_t = i)$ と定義する。すると、帰納的に等式

$$P^{m+1}_{i,j} = \sum_{k=0}^{n} P_{i,k} P^m_{k,j}$$

が成立する。これを成分ごとにまとめると、

$$P^{(m)} = P \cdot P^{(m-1)} \Longrightarrow P^{(m)} = P^m$$

となる。ここで、$P^{(k)}$ は (i, j) 成分が $\Pr(X_{t+k} = j | X_t = i)$ である遷移確率行列である。

また、Markov 連鎖は重み付き有向グラフ $D = (V, E, w)$ として表現することが出来る。この有向グラフの重み付き隣接行列を遷移確率行列と見ることで、有向グラフと Markov 連鎖が対応する。

1.1 3-SAT の乱択アルゴリズムとその解析

2-SAT については、節の個数が k 個であるときに強連結成分分解を用いることで $O(k)$ 時間で充足可能性を厳密に確かめることができ、具体的に真偽の割り当てを求めることも出来る [2]。そこで、ここでは 2-SAT の乱択アルゴリズムの話は割愛し、3-SAT の乱択アルゴリズムについて述べる。

まずは 3-SAT を定式化する。

3-SAT (3-充足可能性問題)

入力　n 個のブール値変数 $x_1, \cdots, x_n$ による、乗法標準形で与えられ、各節は高々 3 つのリテラルの論理和で書かれる論理式 $f(x_1, \cdots, x_n)$
ここで、リテラルとはある変数自身もしくはその否定を表し、乗法標準形とは節の論理積で書かれる論理式のことを表す。

出力　$f(x_1, \cdots, x_n) = 1$ となる $x_1, \cdots, x_n$ の割り当てが存在する場合 `satisfiable` と出力し、$x_1, \cdots, x_n$ の割り当ても出力する。存在しない場合 `unsatisfiable` と出力。

次に、3-SAT に対する乱択アルゴリズムを示す。

3-SAT に対する乱択アルゴリズム

1. n 個の変数それぞれに任意に真偽を割り当てる。
2. 以下の処理を最大 m 回繰り返す。途中で $f(x_1, \cdots, x_n) = 1$ となったら 3. へ進む。
   (a) 充足されていない節を任意に一つ選ぶ。
   (b) その節からリテラルをランダムに一つ選び、その変数の真偽値を変更する。
3. $f(x_1, \cdots, x_n) = 1$ となった場合、`satisfiable` と出力し、現在の割り当てを出力する。
4. そうでない場合、`unsatisfiable` と出力する。

ここで、アルゴリズム中の m はアルゴリズムの成功確率を制御する整数パラメータである。以下、このアルゴリズムの解析を行う。

定理 1.6.

3-SAT の乱択アルゴリズムに、充足可能な論理式 $f(x_1, \cdots, x_n)$ が与えられたとき、手順 2 を繰り返す回数の期待値は $O(2^n)$ である。

【証明】

簡単のため、初期の真偽値の割り当てはそれぞれの変数ごとに独立にランダムに行っていると仮定する。$\boldsymbol{S} \in \{0,1\}^n$ を、$x_j = S_j$ としたときに $f(x_1, \cdots, x_n) = 1$ となる 0-1 ベクトルのうちの一つとする。すなわち、$\boldsymbol{S}$ は f を充足させる $x_1, \cdots x_n$ の割り当てである。また、$\boldsymbol{A}_i \in \{0,1\}^n$ を 手順 2 の i 回目の繰り返しでの各変数への $\{0,1\}$ の割り当てを表す 0-1 ベクトルとし、確率変数 X_i を $\boldsymbol{A}_i$ と $\boldsymbol{S}$ の成分のうち等しいものの個数とする。

今、$1 \leq j \leq n-1$ を満たす整数 j について、

$$\Pr(X_{i+1} = j+1 | X_i = j) \geq \frac{1}{3},\ \Pr(X_{i+1} = j-1 | X_i = j) \leq \frac{2}{3}$$

が成立する。これは、手順 2 で取り出された節が充足されていないということと、少なくとも 1 つのリテラルの真偽値の割り当てが $\boldsymbol{S}$ での割り当てと異なるということが同値だからである。

$X_i = n$ となるまでの回数の期待値を上から抑える。そのために、次のような Markov 連鎖 $Y_0 = X_0, Y_1, \cdots$ を考える。

$$\begin{aligned}
\Pr(Y_{i+1} = 1 | Y_i = 0) &= 1 \\
\Pr(Y_{i+1} = j+1 | Y_i = j) &= 1/3 \\
\Pr(Y_{i+1} = j-1 | Y_i = j) &= 2/3
\end{aligned}$$

h_j を 上記の Markov 連鎖で状態 j から始めて状態 n に辿り着くまでの回数の期待値とする $(0 \leq j \leq n)$。すると、

$$\begin{aligned}
&h_n = 0 \\
&h_j = \frac{2h_{j-1}}{3} + \frac{h_{j+1}}{3} + 1\ (1 \leq j \leq n-1) \\
&h_0 = h_1 + 1
\end{aligned}$$

という漸化式が成り立つ。これを解くと $h_j = 2^{n+2} - 2^{j+2} - 3(n-j)$ が得られる。最初の真偽値の割り当てをランダムに行ったと仮定すると、$X_0 \sim \mathrm{B}(n, 1/2)$ なので、手順 2 を繰り返す回数の期待値は

$$\begin{aligned}
\sum_{j=0}^{n} h_j \left(\frac{1}{2}\right)^j \left(\frac{1}{2}\right)^{n-j} \binom{n}{j} &\leq 4 \sum_{j=0}^{n} \left(1 - \frac{2^j}{2^n}\right) \binom{n}{j} \\
&= 4 \cdot 2^n - 4 \cdot 2^{-n} \sum_{j=0}^{n} 2^j \binom{n}{j} \\
&= 4 \cdot 2^n - 4 \cdot (3/2)^n = O(2^n)
\end{aligned}$$

である。■

このアルゴリズムのままでは、真偽値の割り当てを 2^n 通り試すアルゴリズムと計算量という観点での差が見られない。参考文献 [1] には、このアルゴリズムを修正することで、手順 2 に相当する操作を $O(n^{3/2}(4/3)^n)$ 回にまで減らすアルゴリズムが示されているが、その解析には Markov 連鎖を用いないのでここでは説明を割愛する。

2 状態の分類

Markov 連鎖でモデル化される事象を考察するときに、Markov 連鎖を時間発展させていったときの振る舞いを解析することがある。その足がかりとして、Markov 連鎖の状態を分類することがある。状態空間が有限な Markov 連鎖では、遷移確率行列が表す有向グラフの連結性の議論と、Markov 連鎖の状態の分類の議論を同一視出来る。

定義 2.1. (到達可能性・相互到達可能性)

1. 状態 i が j に到達可能 $\overset{\triangle}{\iff}$ ${}^{\exists}n \geq 0$ s.t. $P^n_{i,j} > 0$。このことを $i \to j$ と書く。
2. 状態 i と j が相互到達可能 $\overset{\triangle}{\iff}$ $i \to j$ かつ $j \to i$。このことを $i \leftrightarrow j$ と書く。

定理 2.2.

相互到達可能性は同値関係である。すなわち、相互到達可能性は反射律・対称律・推移律を満たす。

【証明】

反射律・対称律は定義より明らかなので、推移律を満たすことを示す。$i \leftrightarrow j,\ j \leftrightarrow k$ だと仮定する。

仮定より、$i \to j, j \to k$ なので、${}^{\exists}m_1,\ m_2$ s.t. $P^{m_1}_{i,j} > 0, P^{m_2}_{j,k} > 0$。このとき、

$$P^{m_1+m_2}_{i,k} = \sum_{l=0}^{n} P^{m_1}_{i,l} P^{m_2}_{l,j} \geq P^{m_1}_{i,j} P^{m_2}_{j,k} > 0$$

よって $i \to k$。$k \to i$ も同様に示せる。よってこのとき $i \leftrightarrow k$。■

定理 2.2 より、相互到達可能性は同値関係であることが分かった。ここから、相互到達可能な状態を一つの同値類とみなせるということが見えてくる。

定義 2.3. (既約)

Markov 連鎖が既約 $\overset{\triangle}{\iff}$ すべての状態が互いに相互到達可能

補題 2.4.

有限な Markov 連鎖が既約 $\iff$ Markov 連鎖のグラフ表現 $D = (V, E, w)$ が強連結グラフ

次に、状態の再帰性についての定義をしていく。

定義 2.5. (初到達時間)

状態 j への初到達時間 $T_j := \min\{n \geq 1 | X_n = 1\}$ とする。$X_n = j$ となる n が存在しなければ $T_j = \infty$ とする。

また、$r^t_{i,j} := \Pr(T_j = t | X_0 = i)$ とする。すなわち、状態 i から出発してちょうど t ステップ目で状態 j に到達する確率である。

そして、$r_{i,j} := \displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} r^n_{i,j}$ とする。

定義 2.6. (再帰性)

- 状態 i が再帰的 $\overset{\triangle}{\iff}$ $r_{i,i} = 1$ $(\Pr(T_i < \infty | X_0 = i) = 1)$
- 状態 i が非再帰的 $\overset{\triangle}{\iff}$ $r_{i,i} < 1$ $(\Pr(T_i < \infty | X_0 = i) < 1)$

注意 2.7.

相互到達可能な同値類で、再帰的な状態が存在すれば、その同値類の任意の状態は再帰的な状態である。同様に、相互到達可能な同値類で、非再帰的な状態が存在すれば、その同値類の任意の状態は非再帰的な状態である。(証明は確率数理工学の授業で行っている。)

次に、再帰的な状態を更に分類する。

定義 2.8. (平均到達時刻)

$$h_{i,j} := \begin{cases} \sum_{n=1}^{\infty} n r_{i,j}^n & (\Pr(T_j < \infty | X_0 = i) = 1) \\ \infty & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

とし、$h_{i,i}$ を平均再帰時間と定義する。

定義 2.9.

j を再帰的状態とする。$h_{j,j} < \infty$ であるとき、j が正再帰的であると定義する。そうでないとき、j が 零再帰的であると定義する。

例 2.10. (零再帰的状態の存在)

$S = \{1, 2, 3, \cdots\}$ である Markov 連鎖で、$\Pr(X_{t+1} = i+1 | X_t = i) = i/(i+1)$, $\Pr(X_{t+1} = 1 | X_t = i) = 1/(i+1)$ であるようなものを考える。すると、

$$r_{1,1}^t = \left(\prod_{j=1}^{t-1} \frac{j}{j+1} \right) \cdot \frac{1}{t+1} = \frac{1}{t(t+1)}$$

となるので、$r_{1,1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{t(t+1)} = 1$ である。よって状態 1 は再帰的な状態である。

また、$h_{1,1} = \sum_{n=1}^{\infty} t \cdot \frac{1}{t(t+1)} = \infty$ なので状態 1 は零再帰的な状態である。

補題 2.11.

有限な Markov 連鎖には、少なくとも 1 つ再帰的な状態が存在する。また、有限な Markov 連鎖において、再帰的な状態はすべて正再帰的な状態である。

上記の補題の証明は確率数理工学で行っている。(後にこのレジュメにも付け加える)

最後に、周期について定義する。

定義 2.12. (周期)

- 状態 j が周期的 $\overset{\triangle}{\iff}$ $^{\exists}\Delta$: 2 以上の整数 s.t. $\Pr(X_{t+s} = j | X_t = j) = 0$($s$ がΔで割り切れないとき)。
- Markov 連鎖が周期的 $\overset{\triangle}{\iff}$ Markov 連鎖の任意の状態が周期的
- 周期的でない状態もしくは Markov 連鎖は非周期的であるという。

定義 2.13. (エルゴード的状態)

- 状態 j がエルゴード的 $\overset{\triangle}{\iff}$ 状態 j が非周期的かつ正再帰的
- Markov 連鎖がエルゴード的 $\overset{\triangle}{\iff}$ 任意の状態がエルゴード的

系 2.14.

任意の有限かつ既約かつ非周期的である Markov 連鎖はエルゴード的である。

【証明】

補題 2.11 より、有限な Markov 連鎖はすくなくとも 1 つ再帰的な状態を持っている。そして、Markov 連鎖が既約であれば、すべての状態が再帰的である。再度補題 2.11 を用いれば、有限な Markov 連鎖では任意の再帰的な状態が正再帰的である。よって任意の状態が正再帰的であり、かつ非周期的である。よってこのとき Markov 連鎖はエルゴード的である。■

3 定常分布

ここでは定常分布について見ていく。

定義 **3.1.** (定常分布)

$\boldsymbol{\pi}$ が Markov 連鎖の定常分布 $\overset{\triangle}{\Longleftrightarrow}$ $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi} P$ (平衡方程式) が成立する。

以下の定理の証明は確率数理工学の授業で行っている。(このレジュメにも後に付け加える。)

定理 **3.2.**

任意の、有限かつ既約かつエルゴード的な Markov 連鎖は以下の性質を持つ。

1. Markov 連鎖は定常分布 $\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \cdots, \pi_n)$ を持ち、更に一意である。
2. $^\forall i, j$ について $\lim_{t\to\infty} P_{i,j}^t$ が存在し、その値は j とは独立である。
3. $\pi_i = \lim_{t\to\infty} P_{i,j}^t = 1/h_{i,i}$

注意 **3.3.**

定理 3.2 で出てくる $\boldsymbol{\pi}$ を極限分布という。

例 **3.4.** (Exercise 7.12)

X_n をサイコロを n 回独立に投げる試行での、出た目の和とする。このとき、任意の $k \geq 2$

$$\lim_{n\to\infty} \Pr(X_n \text{が } k \text{ で割り切れる}) = \frac{1}{k}$$

であることを示す。

$Y_n = X_n \bmod k$ とする。このとき、Y_n は状態として $\{0, 1, \cdots, k-1\}$ をもつ Markov 連鎖で、遷移確率行列が

$$P = \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & & & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

という形で表されるものに従う。このとき $\frac{1}{k}\mathbf{1} = \frac{1}{k}\mathbf{1}P$ であるから、定常分布は $\boldsymbol{\pi} = \frac{1}{k}\mathbf{1}$ である。この Markov 連鎖は有限かつ既約かつ非周期的であるから、$\boldsymbol{\pi}$ はこの連鎖の唯一の定常分布である。このとき、

$$\lim_{n\to\infty} \Pr(X_n \text{が } k \text{ で割り切れる}) = \lim_{n\to\infty} \Pr(Y_n = 0) = \lim_{n\to\infty} P_{0,0}^n = \pi_0 = \frac{1}{k}$$

である。■

4　無向グラフ上のランダムウォーク

無向グラフ上のランダムウォークは Markov 連鎖の特殊ケースであり、主にアルゴリズムを解析するときに用いられる。以下、$G = (V, E)$ を $|V| < \infty$ である無向連結グラフであるとする。

定義 **4.1.** (G 上のランダムウォーク)

G 上のランダムウォークとは、G 上の頂点を動く粒子の動いた系列により定められる Markov 連鎖である。この確率過程での状態は、その時刻に粒子が存在する頂点のラベルとする。粒子が頂点 i に存在し、この頂点が $d(i)$ 本の辺を持つとき、粒子が i に隣接する頂点 j に辺 (i, j) を用いて移動する確率は $1/d(i)$ であるとする。

補題 **4.2.**

G 上のランダムウォークが非周期的 $\iff$ G が二部グラフでない

【証明】

グラフが二部グラフであることの必要十分条件は、奇数長の閉路を持たないことである。G が二部グラフでないとき、G は奇数長の閉路をもつため、この奇数長の閉路を一週することで、任意の頂点から自分自身へ戻ってくる奇数長のパス[*2]が得られる。これは Markov 連鎖が非周期的であることを意味する。

また、G が二部グラフのとき、明らかに G のすべての頂点は周期 $d = 2$ を持つので、G は周期的である。■

以降、G は二部グラフでないとする。G が有限な無向連結グラフであり、二部グラフでないとき、G 上のランダムウォークは定理 3.2 の条件をすべて満たすため、このランダムウォークは定常分布 (極限分布) に収束する。興味深いことに、その分布はグラフの各頂点の次数のみに依存する。

定理 **4.3.**

G 上のランダムウォークは以下の定常分布 $\boldsymbol{\pi}$ に収束する。

$$\pi_v = \frac{d(v)}{2|E|}$$

【証明】

$\displaystyle\sum_{v \in V} d(v) = 2|E|$ であるから、

$$\sum_{v \in V} \pi_v = \sum_{v \in V} \frac{d(v)}{2|E|} = 1$$

となる。このことから $\boldsymbol{\pi}$ は V 上の正しい確率分布になっていることがわかる。

P を G 上のランダムウォークの遷移確率行列になる。このとき、$N(v)$ を v に隣接する頂点の集合とすると

$$(\boldsymbol{\pi} P)_v = \sum_{u \in N(v)} \frac{d(u)}{2|E|} \frac{1}{d(u)} = \frac{d(v)}{2|E|} = (\boldsymbol{\pi})_v$$

であるため、$\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi} P$ が成立している。よって $\boldsymbol{\pi}$ はたしかに定常分布である。■

定義 **4.4.** (被覆時間)

グラフ $G = (V, E)$ の被覆時間を、$\max_{v \in V}$ (v からランダムウォークを初めて、G のすべての頂点をたどるまでにかかるステップ数の期待値) と定義する。

[*2] ここでいうパス (path) は単純道 (simple path) ではなく、歩道 (walk) のことを指す。すなわち、s-t に至る頂点の列 $(s, a_1, \cdots, a_n, t)$ であり、$a_1, \cdots, a_n$ の中に重複があっても良いもののことを指している。

補題 4.5.

$(u, v) \in E$ のとき、相互到達時間 $h_{u,v} + h_{v,u}$ は $2|E|$ で抑えられる。

補題 4.6.

$G = (V, E)$ の被覆時間を C_G とすると、C_G は $2|E|(|V| - 1)$ で抑えられる。

4.1 s-t 連結性の判定アルゴリズム

ここでは、無向グラフ $G = (V, E)$ と $s, t \in V$ が与えられたときに、$s - t$ パスが存在するかを確かめる省メモリなアルゴリズムを構築することを考える。この問題は、G に対し深さ優先探索や幅優先探索を行えば簡単に解決できるが、どちらの方法でも空間計算量が $\Omega(|V|)$ になってしまう。そこで、以下のアルゴリズムを利用する。

s-t 連結性判定アルゴリズム

1. G 上のランダムウォークで、s を起点として設定する。
2. 頂点 t に $2|V|^3$ ステップ以内にたどり着けば、パスがあると判定する。そうでないとき、パスが無いと判定する。

定理 4.7.

上記のアルゴリズムは確率 $1/2$ で正しい判定をする。

【証明】

簡単のため、G の連結成分の中に二部グラフはないとする。(二部グラフであるときも、この証明を修正することで示される。)

s-t パスが無い場合、アルゴリズムは正しい答えを返す。パスがある場合、アルゴリズムは $2|V|^3$ ステップで t に到達しなかったときのみ間違った答えを返す。s-t パスがあるとき、s から t にたどり着くまでの時刻はグラフの被覆時間で抑えられ、それは補題 4.6 より $2|E||V| < |V|^3$ で抑えられる。よって、Markov の不等式を適用すると、s を起点とするランダムウォークで t にたどり着くまでにかかる時刻が $2|V|^3$ を超える確率は $1/2$ 以下であることが導かれる。■

注意 4.8.

上記のアルゴリズムは実際にパスがある場合にパスが無いと判定する可能性はあるが、逆の可能性は無い。

このアルゴリズムでは、自身がどの頂点にいるかという情報と、今のステップ数の情報のみを保持すれば良いが、頂点のラベルは高々 $|V|$ まで、ステップ数のラベルは高々 $2|V|^3$ であるので、これらの情報を管理するのに必要な空間計算量は $O(\log |V|)$ bit のみである。よって、隣接する頂点に移動する何らかの手続きがあるとすれば、必要な空間計算量はこれだけになり、極めて省メモリである。

参考文献

[1] Michael Mitzenmacher and Eli Upfal, “Probability and Computing: Randomization and Probabilistic Techniques in Algorithms and Data Analysis”, Cambridge University Press, 2nd ed., 2017.

[2] 秋葉拓哉, 岩田陽一, 北川宜稔,『プログラミングコンテストチャレンジブック 第 2 版』, 株式会社マイナビ, 2012.