マルコフ連鎖

目 次

1　確率過程

ここでは確率過程，定常過程，逆過程，可逆性の定義を示す．

定義 1.1　（確率過程） $\mathcal{T}$ をパラメータ空間とし，$t \in \mathcal{T}$ に対して確率変数 X_t が定義されているとする．この時，確率変数の族 $\{X_t, t \in \mathcal{T}\}$ を確率過程 *(stochastic process)* という．

- 通常，パラメータとしては時間を考える．時間が整数値を取る場合を離散時間確率過程，実数値を取る場合を連続時間確率過程という．
- 基礎になる確率空間を $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ とし，$\omega \in \Omega$ に対して $\{X_t(\omega), t \in \mathcal{T}\}$ を標本関数 (sample path) という．
- 確率過程 $\{X_t\}$ の確率法則は，任意個の時点の組に対して次の同時分布で与えられる．

$$F(x_1, x_2, ..., x_n; t_1, t_2, ..., t_n) = P(X_{t_1} \leq x_1, X_{t_2} \leq x_2, ..., X_{t_n} \leq x_n) \tag{1.1}$$

定義 1.2　（定常過程） 時間をずらしても同時分布が変化しない確率過程を定常過程 *(stationary process)* または強定常過程という．すなわち，任意個の時点の組と任意の h に対して，

$$F(x_1, x_2, ..., x_n; t_1, t_2, ..., t_n) = F(x_1, x_2, ..., x_n; t_1 + h, t_2 + h, ..., t_n + h) \tag{1.2}$$

が成り立つ場合をいう．また，この性質を定常性という．

- 定常過程では，状態確率 $p_i = P(X_t = i)$ が時点によらず不変となる．その意味で $\boldsymbol{p} = (p_i)$ を定常分布という．
- また，$\lim_{t\to\infty} P(X_t = i)$ を（もし存在すれば）極限確率という．ある条件を満たすマルコフ連鎖では，極限分布が定常分布に一致するため，定常分布を用いてシステムの評価をすることが多い．

定義 1.3　（逆過程） ある t_0 に対して，$Y(t) = X(t_0 - t)$ で定義される確率過程 $\{Y(t)\}$ をもとの確率過程 $\{X(t)\}$ の逆過程という[1]．

定義 1.4　（可逆性） 任意個の時点の組と任意の t に対して，時間の方向を逆にした場合の同時分布が等しい，すなわち，

$$F(x_1, x_2, ..., x_n; t_1, t_2, ..., t_n) = F(x_1, x_2, ..., x_n; t - t_1, t - t_2, ..., t - t_n) \tag{1.3}$$

となる性質を可逆性という．

- 逆過程は時間の進行方向を逆にした確率過程であり，可逆性とは時間の進行方向を逆にしても確率的な性質が変わらないことを指す．この逆過程と可逆性はマルコフ連鎖を解析する上で非常に役に立つ概念である．
- 可逆であれば定常である.（証明せよ）

[1] パラメータ空間は適切に与えられているものとする．

2　離散時間マルコフ連鎖

以下では，可算集合 S（特に断らない限りは $S = \{0, 1, ...\}$）を状態空間とし，時間を離散（$\mathcal{T} = \{0, 1, ...\}$）とした確率過程 $\{X_n\}$ について考えていく．現在の状態 X_k が与えられたという条件の下，$\{X_n\}$ の時点 k 以降における確率的挙動が過去の状態（時点 k より前の状態）に独立である時，$\{X_n\}$ を離散時間マルコフ連鎖という．この節の目標は，離散時間マルコフ連鎖の定常分布と極限分布について考察することにある．また，その中で前者については不変測度という概念，後者についてはカップリング (coupling) という概念を学んでいく．

2.1　離散時間マルコフ連鎖と関連する基本概念

離散時間マルコフ連鎖を定義し，その既約性 (irreducibility) と周期性 (periodicity) について示す．これらの基本概念は，マルコフ連鎖の定常分布と極限分布を考える上で重要な役割を果たす．

2.1.1　離散時間マルコフ連鎖の定義

離散時間マルコフ連鎖は，条件付き確率に関する次の性質をもつ離散時間確率過程として定義される．

定義 2.1（離散時間マルコフ連鎖） 確率過程 $\{X_n\}$ が次を満たす時，**離散時間マルコフ連鎖 (discrete-time Markov chain)** という．

$$\forall n \geq 0,\ \forall i_0, ..., i_{n+1} \in S,\ P(X_{n+1} = i_{n+1} \,|\, X_n = i_n, X_{n-1} = i_{n-1}, X_0 = i_0) = P(X_{n+1} = i_{n+1} \,|\, X_n = i_n)$$

この性質を**マルコフ性 (Markov property)** という．

$\boldsymbol{O}$ を要素が全て 0 の行列，$\boldsymbol{0}$ を要素が全て 0 の列ベクトル，$\boldsymbol{e}$ を要素が全て 1 の列ベクトルとする．行列 $\boldsymbol{P}$ で $\boldsymbol{P} \geq \boldsymbol{O}$ かつ $\boldsymbol{Pe} = \boldsymbol{e}$ であるものを**確率行列 (stochastic matrix)**，行ベクトル $\boldsymbol{a}$ で $\boldsymbol{a} \geq \boldsymbol{0}^\top$ かつ $\boldsymbol{ae} = 1$ であるものを**確率ベクトル (stochastic vector)** という[2]．離散時間マルコフ連鎖の推移確率行列とは状態推移に関する確率行列であり，これが時点に依存せず一定である場合，マルコフ連鎖は斉時的であるという．斉時的なマルコフ連鎖の確率法則は推移確率行列と初期分布により与えられる．また，斉時的なマルコフ連鎖の様々な性質はこの推移確率行列によって決定される．斉時的なマルコフ連鎖を分析することは推移確率行列を分析することであるとも言える．

定義 2.2（推移確率行列，斉時的なマルコフ連鎖） 離散時間マルコフ連鎖 $\{X_n\}$ について，

$$p_{ij}(m, n) = P(X_{m+n} = j \,|\, X_m = i)$$

を（時点 m からの）状態 i から j への n ステップ**推移確率 (transition probability)**，確率行列 $\boldsymbol{P}(m, n) = (p_{ij}(m, n))$ を（時点 m からの）n ステップ**推移確率行列 (transition probability matrix)** という．（ただし，$\boldsymbol{P}(m, 0) = \boldsymbol{I}$ とする．）推移確率行列が時点に依存しない，すなわち，

$$\forall m, n \geq 0, \boldsymbol{P}(m, n) = \boldsymbol{P}(0, n) = \boldsymbol{P}^{(n)} = (p_{ij}^{(n)})$$

を満たすマルコフ連鎖を**斉時的なマルコフ連鎖 (time-homogeneous Markov chain: HMC)** という．

以下では，HMC についてのみ考えていく．推移確率行列に対して次の等式が成り立つ[3]．

定理 2.1（チャップマン・コルモゴロフの等式; Chapman-Kolmogorov equation）

$$\forall n, k \geq 0,\ \boldsymbol{P}^{(n+k)} = \boldsymbol{P}^{(n)} \boldsymbol{P}^{(k)} \tag{2.1}$$

（要素表現は，$p_{ij}^{(n+k)} = \sum_{\ell \in S} p_{i\ell}^{(n)} p_{\ell j}^{(k)}$ となる．）

（証明） 全確率の定理とマルコフ性を用いれば良い．（確認せよ）　□

- $\boldsymbol{P} = (p_{ij}) = \boldsymbol{P}^{(1)}$ とおく．チャップマン・コロモゴルフの等式より，$\boldsymbol{P}^{(n)} = \boldsymbol{P}^n$ となる．
- HMC に対する様々な性質（既約性，周期性，再帰性など）は推移確率行列 $\boldsymbol{P}$ によって決る．以下では，そのような性質にたいしては HMC と推移確率行列を同一視する．

確率ベクトル $\boldsymbol{a} = (a_i)$, $a_i = P(X_0 = i)$ を**初期分布 (initial distribution)**，確率ベクトル $\boldsymbol{a}(n) = (a_i(n))$, $a_i(n) = P(X_n = i)$ （$\boldsymbol{a}(n) = \boldsymbol{aP}^{(n)}$）を時点 n での状態分布という．HMC の確率法則に対して次が成り立つ．

[2]この資料では，慣用的に確率ベクトルを行ベクトルとして与え，その他のベクトルは全て列ベクトルとして与える．$\boldsymbol{A}^\top$ は転置行列を表す．
[3]同様な等式は非斉時的なマルコフ連鎖に対しても成り立つ．

補題 2.1 （HMC の確率法則） *HMC* の確率法則は初期分布 $\boldsymbol{a}$ と推移確率行列 $\boldsymbol{P}$ によって決まる．

（証明） 任意の同時分布が $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{P}$ を用いて書けることを示せばよい．（確認せよ） □

例 2.1 （インターネットサーフィン） 次にどのページへ移るかの確率が推移確率に対応する．以下は，ページ数が 10 の場合の推移確率行列の例である．

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 0.2 & 0.5 & 0.3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.8 & 0.2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.5 & 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.6 & 0.4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.1 & 0.9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.3 & 0.7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.4 & 0.6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3 & 0 & 0 & 0 & 0.3 & 0 & 0.2 & 0 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.4 & 0.6 \end{pmatrix}$$

例 2.2 （再帰式で構成される HMC） S を可算集合とする．$\{Z_n\}$ を S 上の i.i.d. 確率変数列，X_0 を $\{Z_n\}$ に独立な S 上の確率変数，f を $S \times S$ から S への関数とする．この時，再帰式 $X_{n+1} = f(X_n, Z_{n+1}), n \geq 0$ で構成される確率過程 $\{X_n\}$ は HMC となる[4]．（証明は文献 Brémaud(1998) を参照）

例 2.3 （2 次元格子点上のランダムウォーク） ランダムウォークは再帰式で構成される HMC である．例えば，$S = \mathcal{Z}^2$ とし，$P(Z_n = (1,0)) = q_1$, $P(Z_n = (0,1)) = q_2$, $P(Z_n = (-1,0)) = q_3$, $P(Z_n = (0,-1)) = q_4 = 1 - (q_1 + q_2 + q_3)$ とすると，$X_{n+1} = X_n + Z_{n+1}$ で与えられる $\mathcal{Z}^2$ 上の確率過程 $\{X_n\}$ は 2 次元格子点上のランダムウォークとなる．

2.1.2 状態の分割

ある状態からある状態へ有限の時間内に推移可能なことを到達可能という．この概念は，長時間経過後に状態がどの部分空間に属するかを考察する上で重要となる．既約な HMC とは，全ての状態が互いに到達可能な HMC のことであり，マルコフ連鎖の理論では中心的役割を果たす．ちなみに，到達可能とは，状態推移図（有向グラフ）における有向パスの存在に対応する．

定義 2.3 （到達可能と相互到達可能） ある $n \geq 0$ に対して $p_{ij}^{(n)} > 0$ ならば j は i から**到達可能 (reachable)** であるという．これを $i \to j$ と記述する．さらに，$i \to j$ かつ $j \to i$ ならば i と j は**相互到達可能 (mutually reachable or communicate)** であるという．これを $i \leftrightarrow j$ と記述する．

- $p_{ii}^{(0)} = 1$ であるので，任意の状態は自分自身と相互到達可能である．
- 次の性質は状態推移図における有向パスの存在に対応するもので，定理の証明などで度々用いられる．

$$p_{ij}^{(n)} > 0 \Rightarrow \exists i_1, i_2, ..., i_{n-1} \in S \text{ s.t. } p_{ii_1} p_{i_1 i_2} ... p_{i_{n-1} j} > 0$$

関係 $\leftrightarrow$ は反射律，対称律，推移律を満たすので同値関係であり，状態空間 S は $\leftrightarrow$ によって同値類に分割される．ひとつひとつの類を**クラス (class)** という．後に示す HMC の性質（周期性や再帰性）は，クラス毎の性質として与えられる．次に示す既約な集合とは，一度そのクラスに入るとそこからは抜け出せないクラスのことである．HMC の状態空間は，いくつかの既約な集合と，それ以外の集合に分割される．

定義 2.4 （既約な集合と吸収状態） $C \subset S$ が二つの条件

(1) $\forall i, j \in C$, $i \leftrightarrow j$,

(2) $\forall i \in C$, $\sum_{j \in C} p_{ij} = 1$

[4] $\boldsymbol{U}_n$ を一様乱数を要素とするのベクトルとし，その系列を $\{\boldsymbol{U}_n\}$ とする．$\boldsymbol{U}_{n+1}$ と X_n が与えられた時に，X_{n+1} を生成する斉時的なルールを f とする．この時，$X_{n+1} = f(X_n, \boldsymbol{U}_{n+1}), n \geq 0$ で構成される確率過程 $\{X_n\}$ はやはり HMC となる．これが HMC に対するモンテカルロシミュレーションの原理として使われている．

を満たす時，C を**既約な集合** **(irreducible set)** という．また，条件 (2) のみをみたす場合は C を**閉集合** **(closed set)** という．既約な集合が唯一の状態からなる場合，その状態を**吸収状態** **(absorbing state)** という．

定義 2.5 （既約なマルコフ連鎖） 状態空間が唯一の既約な集合からなる HMC を**既約なマルコフ連鎖** **(irreducible Markov chain)** という．そうでない場合，**可約** **(reducible)** という．

補題 2.2 （状態空間の分割） *HMC* の状態空間 S はいくつかの既約な集合（クラス）と高々ひとつの非既約な集合（既約な集合に含まれない状態の集合）に分割される．

（証明） S が同値関係 $\leftrightarrow$ によって同値類に分割されることを考えればよい．(確認せよ) □

例 2.4 例 2.1 の状態空間は 4 つのクラス（$S_1 = \{0,1,2\}$, $S_2 = \{3,4,5,6\}$, $S_3 = \{7\}$, $S_4 = \{8,9\}$）から成り，S_1, S_2, S_3 は既約なクラス，状態 7 は吸収状態である．例 2.3（2 次元格子点上のランダムウォーク）は既約な HMC である．

2.1.3 周期

同じ状態に戻ってくるまでの時間（ステップ数）がある整数 $d \geq 1$ の倍数である時，この d を周期という．周期はクラスの性質であり，既約な集合（クラス）は周期と同じ数だけの周期クラスに分割される．HMC の状態はこの周期クラスを順に巡るように推移する．このことから分かるように，極限分布が収束する（振動しない）ためには周期は 1 でなければならないことが後に示される．

定義 2.6 （周期と周期性） 状態 $i \in S$ に対して $d_i = \text{g.c.d.}\{n \geq 1 \,|\, p_{ii}^{(n)} > 0\}$ を状態 i の**周期** **(period)** という．ただし，任意の $n \geq 0$ に対して $p_{ii}^{(n)} = 0$ ならば $d_i = \infty$ とする．$d_i > 1$ の時，状態 i を**周期的** **(periodic)** といい，$d_i = 1$ の時，**非周期的** **(aperiodic)** という．

補題 2.3 （周期はクラスの性質）

$$i \leftrightarrow j \Rightarrow d_i = d_j$$

（証明） $i \leftrightarrow j$ より，$\exists n, m \geq 0$ s.t. $p_{ij}^{(n)} > 0$, $p_{ji}^{(m)} > 0$．この n, m に対して $p_{ii}^{(n+m)} \geq p_{ij}^{(n)} p_{ji}^{(m)} > 0$ より，$n+m$ は d_i の倍数．また，$p_{jj}^{(k)} > 0$ を満たす任意の $k \geq 1$ に対して $p_{ii}^{(n+k+m)} \geq p_{ij}^{(n)} p_{jj}^{(k)} p_{ji}^{(m)} > 0$ より，$n+k+m$ は d_i の倍数．従って k も d_i の倍数である．d_j はこのような k の最大公約数なので d_i の倍数となる．同様にして，d_i は d_j の倍数であることが示せるので $d_i = d_j$ である． □

- この補題より，既約な HMC の周期性は特定の状態についてのみチェックすればよいことが分かる．

既約で非周期的であれば，任意の $i, j \in S$ に対し，十分大きな n_0 をとれば，$n \geq n_0$ である全ての n に対して $p_{ij}^{(n)} > 0$ であることが示される．これは，ある状態からある状態へ推移する確率は，十分時間が経過すれば正となることを示している．次の定理は，これを周期がある場合も含めて示したものである．

補題 2.4 （n ステップ推移確率の正値性）

既約で周期が $d \geq 1$ の推移確率行列を $\boldsymbol{P}$ とする．この時，次が成り立つ．

$$\forall i, j \in S,\ \exists m, n_0 \geq 0 \ \textit{s.t.}\ p_{ij}^{(m+nd)} > 0 \ \textit{for all}\ n \geq n_0. \tag{2.2}$$

（証明） まず，$i = j$ の場合を考える．$A = \{k \geq 1 \,|\, p_{jj}^{(k)} > 0\}$ とすると，A の最大公約数は d であり，A は和について閉じているので，2.1.4（整数論に関する補足）の補題 2.7 より A は有限個を除いて d の正の倍数を全て含む．よって，$\exists n_0 \geq 0$ s.t. $p_{jj}^{(nd)} > 0$ for all $n \geq n_0$.

$i \neq j$ の場合は，$i \to j$ より $\exists m \geq 0$ s.t. $p_{ij}^{(m)} > 0$ なので，$p_{ij}^{(m+nd)} \geq p_{ij}^{(m)} p_{jj}^{(nd)} > 0$ for all $n \geq n_0$. □

- この補題より，状態空間が有限で，$\boldsymbol{P}$ が既約かつ非周期的であれば直ちに次が得られる．(状態空間が有限でなければこれは必ずしも言えないことに注意)

$$\exists n_0 \geq 0 \text{ s.t. } \boldsymbol{P}^{(n)} > \boldsymbol{O} \text{ for all } n \geq n_0.$$

定理 2.2 （周期クラスによる状態の分割）
周期 $d \geq 1$ を持つ既約な HMC の状態空間 S は，次の性質を満たす d 個の部分空間（周期クラス）$C_0, C_1, ..., C_{d-1}$ に分割される．

$$0 \leq \forall k \leq d-1,\ \forall i \in C_k,\quad \sum_{j \in C_{k+1}} p_{ij} = 1$$

ただし，$C_d = C_0$ とする．この分割は唯一である．

（証明） 補題 2.4 において，m の範囲は $0 \leq m \leq d-1$ としてよい．これより，ある状態 i を基準として，$C_k = \{j \in S\,;\, \exists n \geq 0 \text{ s.t. } p_{ij}^{(k+nd)} > 0\}$, $k = 0, 1, ..., d-1$, と与えれば，条件を満たす唯一の分割となる．(確かめよ) □

- この定理より，HMC の状態は，$C_0 \to C_1 \to ... \to C_{d-1} \to C_0 \to ...$ の順に推移していくことが分かる．
- 周期が d の時，状態数が有限であれば，状態を適当に並べ変えることで $\boldsymbol{P}$ は d 個の小行列からなるブロック構造を示す.

例 2.5 例 2.1 の状態空間は 4 つのクラス（$S_1 = \{0, 1, 2\}$, $S_2 = \{3, 4, 5, 6\}$, $S_3 = \{7\}$, $S_4 = \{8, 9\}$）から構成されていたが，S_1, S_3, S_4 の周期は 1，S_2 の周期は 2 である．S_2 は二つの周期クラス $\{3, 4\}$ と $\{5, 6\}$ に分割される．また，例 2.3（2 次元格子点上のランダムウォーク）の周期は 2 である．

2.1.4 整数論に関する補足

ここでは，補題 2.4 に必要な整数論に関する補題を示す．詳しくは文献 Brémaud(1998) を参照のこと．

補題 2.5 $S \subset \mathcal{Z}$ を少なくともひとつ非ゼロ要素を含む整数の部分集合とし，和と差について閉じているものとする．この時，S は最小の正の要素 a を含み，$S = \{ka \,|\, k \in \mathcal{Z}\}$ となる．

（証明） c をゼロでない S の要素とする．この時，$0 = c - c \in S$ であることから $-c = 0 - c \in S$．よって，S は少なくともひとつ正の要素を持つので，正の要素の最小値を a とする．この時，$\{ka \,|\, k \in \mathcal{Z}\} \subset S$ である．

次に，$c \in S$ とすると，ある $k \in \mathcal{Z}$ に対して $c = ka + r$, $0 \leq r < a$ となる．しかし，$r > 0$ とすると，$r = c - ka \in S$ となり，a の最小性に矛盾する．よって，$r = 0$ であり，$S \subset \{ka \,|\, k \in \mathcal{Z}\}$. □

補題 2.6 $a_1, ..., a_k$ を正の整数とし，d をその最大公約数とする．この時，$\exists n_1, ..., n_k \in \mathcal{Z}$ $s.t.$ $d = \sum_{i=1}^k n_i a_i$.

（証明） $S = \{\sum_{i=1}^k n_i a_i \,|\, n_1, ..., n_k \in \mathcal{Z}\}$ とすると，S は和と差について閉じている．よって，補題 2.5 より，$a = \sum_{i=1}^k n_i a_i$ を正の最小値として $S = \{ka \,|\, k \in \mathcal{Z}\}$ が成り立つ．$a_1, ..., a_k$ は d の倍数なので a は d の倍数（$a \geq d$）．各 a_i は S の要素なので a は $a_1, ..., a_k$ の公約数であり，$d \geq a$．よって，$d = a = \sum_{i=1}^k n_i a_i$. □

補題 2.7 和について閉じている正の整数の集合を $A = \{a_n \,|\, n \geq 1\}$ とし，その最大公約数を $d = g.c.d.\ A$ とする．この時，A は有限個の要素を除いて d の正の倍数を全て含む.

（証明） $d > 1$ の場合は全ての要素を d で割れば同様の議論ができるので，$d = 1$ と仮定する．

最大公約数が 1 となるような A の要素を $a_1, ..., a_k$ とする[5]．補題 2.6 より，$\exists n_1, ..., n_k \in \mathcal{Z}$ s.t. $1 = \sum_{i=1}^k n_i a_i$ である．この和を正の部分と負の部分に分けることで，$1 = M - P$, $M, P \in A$ と表せる．

そこで，任意の $n \geq P(P-1)$ について考える．この n を $n = mP + r$, $0 \leq r < P$ と表すと，$m \geq P - 1$ である．よって，$1 = M - P$ と $m - r \geq 0$ $M, P \in A$ より $n = kP + r(M - P) = (m - r)P + rM \in A$ となり，補題の結果が得られる． □

2.2 定常分布と再帰性

定常分布とは，時間が経過しても不変であるような状態分布を指す．HMC を用いた解析では，この定常分布あるいはそれをもとにした評価量を考えることが多い．理由としては，粒子系などの物理システムが平衡に達した状態を表す尺度として適当であること，通信システムや生産システムなどの人工的なシステムが安定して動作している状態を表す尺度として適当であることなどが挙げられる．また，長時間経過後におけるシステムの状態分布がある条件の

[5] $d_n = \text{g.c.d.}\{a_1, ..., a_n\}$ とすると，d_n は単調減少で下に有界（$d_n \geq 1$）であり，1 以上 a_1 以下の有限個の値しか取らない．よって，このような $a_1, ..., a_k$ が存在する．

下で定常分布へ収束すること（極限定理），評価量の長時間平均が定常分布に関する期待値で与えられること（エルゴード定理）などが理論面からそれを支えている．

定常分布の存在と関連した重要な概念として再帰性がある．再帰性とは，ある状態から出発してその状態に戻る確率と戻るまでの時間についての性質である．この小節では，定常分布と再帰性の定義を与え，関連する基本的な性質について示す．

2.2.1 定常分布の定義

HMC の定常分布 $\boldsymbol{\pi}$ は推移確率行列 $\boldsymbol{P}$ を用いて定義される．また，推移確率行列が $\boldsymbol{P}$ で与えられる定常過程（定常な HMC）は定常分布 $\boldsymbol{\pi}$ と推移確率行列 $\boldsymbol{P}$ によって構成することができる．

定義 2.7 （定常分布） 推移確率行列 $\boldsymbol{P}$ に対して，$\boldsymbol{\pi P} = \boldsymbol{\pi}$ を満たす確率ベクトル $\boldsymbol{\pi}$ が存在する時，$\boldsymbol{\pi}$ を $\boldsymbol{P}$ またはそれに対応する HMC の**定常分布** **(stationary distribution)** という．

- 定常分布は，もし，存在するのであれば方程式 $\boldsymbol{xP} = \boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{xe} = 1$ を満たす解として与えられる．$\boldsymbol{xP} = \boldsymbol{x}$ を定常方程式という．
- 定常分布は存在しない場合もあるし，複数存在する場合もある．この小節と次の小節の目標は，定常分布が唯一存在する条件を見い出すことである．

例 2.6 例 2.1 の推移確率行列の定常分布は,

$$\boldsymbol{\pi}_1 = \begin{pmatrix} \frac{80}{169} & \frac{5}{13} & \frac{24}{169} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\boldsymbol{\pi}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{13}{70} & \frac{11}{35} & \frac{1}{7} & \frac{5}{14} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\boldsymbol{\pi}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

として,

$$\boldsymbol{\pi} = q_1\boldsymbol{\pi}_1 + q_2\boldsymbol{\pi}_2 + q_3\boldsymbol{\pi}_3,\ q_1, q_2, q_3 \geq 0,\ q_1 + q_2 + q_3 = 1$$

で与えられる．このことから次の点が示唆される.（証明ではない！）

- 定常分布は既約な集合に関する定常分布の線形結合で表される．よって，定常分布は既約な集合を単位に考えればよい．
- 周期的であっても定常分布は存在する.（両者についてはもう少し複雑な関係がある.）
- 既約な集合に含まれない状態の定常確率はゼロになる．

定理 2.3 （定常な HMC）
定常分布を初期分布とする *HMC* は定常である．

（証明） 同時分布が時点に依存しないことを示せばよい.（確認せよ） □

2.2.2 強マルコフ性

ある事象が起きたかどうかを現在及び過去の状態から判断できる時，その事象が起きる時点を停止時間という．マルコフ性は任意の固定された時点に対して定義されたが，それを停止時間に置き換えたのが強マルコフ性である．停止時間の例としては後に示す初到達時間（ある状態に初めて到達するまでの時間）などがあり，強マルコフ性の概念は停止時間を用いた解析を見通のよいものにする．

定義 2.8 （停止時間） $\{X_n\}$ を S 上の離散時間確率過程とする．時点を値とする確率変数 τ（$\tau = \infty$ の場合を含める）で，$\tau = n$ であるかどうかが $X_0, X_1, ..., X_n$ の値によって決る（すなわち，$1_{\{\tau=n\}}$ が $X_0, X_1, ..., X_n$ の関数として与えられる）ものを $\{X_n\}$ の**停止時間** **(stopping time)** という．

定理 2.4 （強マルコフ性）
$\{X_n\}$ を状態空間 S 上の *HMC*，$\boldsymbol{P} = (p_{ij})$ をその推移確率行列とする．τ を $\{X_n\}$ の停止時間とすると，次の**強マルコフ性** **(strong Markov property)** が成り立つ．

$$\forall i, j \in S,\ P(X_{\tau+1} = j \,|\, X_\tau = i,\, X_k,\, 0 \leq k < \tau) = P(X_{\tau+1} = j \,|\, X_\tau = i) = p_{ij}$$

（証明） 条件付き確率の定義より，

$$P(X_{\tau+1}=j\,|\,X_\tau=i,\,X_k,\,0\le k<\tau)=\frac{P(X_{\tau+1}=j,\,X_\tau=i,\,X_k,\,0\le k<\tau)}{P(X_\tau=i,\,X_k,\,0\le k<\tau)}$$

が得られる．さらに，全確率の公式より，右辺の分子は

$$\begin{aligned}\text{分子}&=\sum_{r\ge 0}P(\tau=r,\,X_{r+1}=j,\,X_r=i,\,X_k,\,0\le k<r)\\&=\sum_{r\ge 0}P(X_{r+1}=j\,|\,X_r=i,\,\tau=r,\,X_k,\,0\le k<r)P(\tau=r,\,X_r=i,\,X_k,\,0\le k<r)\end{aligned}$$

となる．ところで，事象 $\{\tau=r\}$ は $\{X_k,\,0\le k\le r\}$ によって構成されるので，マルコフ性より

$$P(X_{r+1}=j\,|\,X_r=i,\,\tau=r,\,X_k,\,0\le k<r)=P(X_{r+1}=j\,|\,X_r=i)=p_{ij}$$

となる．これを上記の式に代入して整理することで定理の式が得られる． □

- この定理では強マルコフ性の最も基本的な性質のみを示した．さらに，任意の $i\in S$ に対して，$X_\tau=i$ という条件の下，

  (i) 時点 τ より前の過程と時点 τ より後の過程は独立である，

  (ii) 時点 τ より後の過程は推移確率行列を $\boldsymbol{P}$ とする HMC となる，

  の 2 点が成り立つ．詳しくは Brémaud(1998) を参照．

2.2.3 再帰性

ある状態からその状態に戻る確率（再帰確率）が 1 の時，その状態は再帰的であるという．さらに，初めて戻るまでの経過時間（再帰時間）の平均が有限である時，その状態は正再帰的であるという．再帰性は周期と同様にクラスの性質であり，また，定常分布や極限分布の存在はこの再帰性と深く関係している．

定義 2.9 （初到達時間） $T_j=\inf\{n\ge 1\,|\,X_n=j\}$ を状態 j への**初到達時間 (first passage time)** という．ただし，$\forall n\ge 1,\ X_n\ne j$ ならば $T_j=\infty$ とする．$X_0=j$ の時は T_j を状態 j への**再帰時間 (recurrence time)** という．

- $\{T_j=n\}=\{X_n=j,\,X_k\ne j,\,1\le k\le n-1\}$ より，初到達時間は停止時間であることが分かる．

状態 i から出発した場合の T_j の確率関数を

$$f_{ij}^{(n)}=P(T_j=n\,|\,X_0=i)=P(X_n=j,\,X_k\ne j,\,1\le k\le n-1\,|\,X_0=i),\ n\ge 1,\quad f_{ij}^{(0)}=0$$

とする．さらに，状態 i から状態 j への**到達確率**を

$$f_{ij}=P(T_j<\infty\,|\,X_0=i)=\sum_{n=1}^{\infty}f_{ij}^{(n)}$$

で与える．$f_{ij}=1$ の時，状態 i から出発した場合の T_j の期待値を

$$\mu_{ij}=\mathrm{E}[T_j\,|\,X_0=i]=\sum_{n=1}^{\infty}nf_{ij}^{(n)}$$

とする．ただし，$f_{ij}<1$ の時は $\mu_{ij}=\infty$ とする．再帰性はこれら f_{ij} と μ_{ij} によって定義される．

定義 2.10 （一時的，正再帰的，零再帰的） $f_{ii}=1$ の時，状態 i は**再帰的 (recurrent or persistent)**，$f_{ii}<1$ の時，状態 i は**一時的 (transient)** という．再帰的な状態 i について，$\mu_{ii}<\infty$ ならば**正再帰的 (positive recurrent)**，$\mu_{ii}=\infty$ ならば**零再帰的 (null recurrent)** という．

次の補題は，n ステップで状態 i から j に推移する確率が，k ステップで i から j に初めて到達し，残りのステップで j から j に推移する確率の k に関する和で与えられることを示すものであり，後の証明でしばしば用いられる．

補題 2.8 （n ステップ推移確率と初到達時間分布の関係）

$$p_{ij}^{(n)}=\sum_{k=1}^{n}f_{ij}^{(k)}p_{jj}^{(n-k)},\ n\ge 1 \tag{2.3}$$

（証明） $k > n$ ならば $P(X_n = j, T_j = k \,|\, X_0 = i) = 0$ であることに注意し， 全確率の公式から次が得られる．

$$p_{ij}^{(n)} = P(X_n = j \,|\, X_0 = i) = \sum_{k=1}^{n} P(X_n = j, T_j = k \,|\, X_0 = i)$$

さらに，$\{T_j = k\} = \{X_k = j, X_m \neq j, 1 \leq m \leq k-1\}$ とマルコフ性により次が得られる．

$$\begin{aligned} P(X_n = j, T_j = k \,|\, X_0 = i) &= P(T_j = k \,|\, X_0 = i) P(X_n = j \,|\, T_j = k, X_0 = i) \\ &= P(T_j = k \,|\, X_0 = i) P(X_n = j \,|\, X_k = j) = f_{ij}^{(k)} p_{jj}^{(n-k)} \end{aligned}$$

これをもとの式に代入して定理の式が得られる． □

次に，状態が一時的であるための必要十分条件と一時的状態の極限確率を与える．前者の必要十分条件は推移確率行列のある性質として与えられる．後者の極限確率は容易に予想されるようにゼロへ収束する．再帰的（特に正再帰的）である場合については次の小節とその次の小節で扱う．

定理 2.5 （一時的であるための必要十分条件）

$$\text{状態 } j \text{ が一時的} \Leftrightarrow \sum_{n=0}^{\infty} p_{jj}^{(n)} < \infty$$

（証明） $p_{ij}^{(n)}$ の n に関する母関数を $P_{ij}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n p_{ij}^{(n)}$， $f_{ij}^{(n)}$ の n に関する母関数を $F_{ij}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n f_{ij}^{(n)}$ とする（ただし，$|z| < 1$）．この時，式 (2.3) と $p_{ij}^{(0)} = \delta_{ij}$ より，

$$P_{ij}(z) = \delta_{ij} + F_{ij}(z) P_{jj}(z)$$

が得られる．ここで，δ_{ij} はデルタ関数（$i = j$ なら 1，$i \neq j$ なら 0 をとる関数）である．これより，$i = j$ の時は

$$P_{jj}(z) = \frac{1}{1 - F_{jj}(z)} \tag{2.4}$$

が得られる．ここで，$\lim_{z \uparrow 1} P_{jj}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} p_{jj}^{(n)}, \lim_{z \uparrow 1} F_{jj}(z) = \sum_{n=1}^{\infty} f_{jj}^{(n)} = f_{jj}$ であるから，状態 j が一時的であれば $f_{jj} < 1$ なので，$\sum_{n=0}^{\infty} p_{jj}^{(n)} < \infty$ となる．同様に，

$$F_{jj}(z) = 1 - \frac{1}{P_{jj}(z)}$$

より，$\sum_{n=0}^{\infty} p_{jj}^{(n)} < \infty$ であれば，$f_{jj} < 1$ が得られる． □

- この定理の対偶をとることで，状態 j が再帰的であるための必要十分条件が得られる．

  $$\text{状態 } j \text{ が再帰的} \Leftrightarrow \sum_{n=0}^{\infty} p_{jj}^{(n)} = \infty$$

- 単調収束定理[6]より，

  $$\sum_{n=0}^{\infty} p_{jj}^{(n)} = \sum_{n=0}^{\infty} P(X_n = j \,|\, X_0 = j) = \sum_{n=0}^{\infty} E[1_{\{X_n = j\}} \,|\, X_0 = j] = \mathrm{E}\left[\sum_{n=0}^{\infty} 1_{\{X_n = j\}} \,\middle|\, X_0 = j \right].$$

  が得られる．ここで，$N_j = \sum_{n=0}^{\infty} 1_{\{X_n = j\}}$ は状態 j への**訪問回数**である．よって，定理 2.5 は訪問回数の期待値に関する条件であることが分かる．

- 訪問回数 N_j については，さらに

  $$j \text{ が再帰的} \Rightarrow P(N_j = \infty) = 1$$

  であることが示される．詳しくは Brémaud(1998) を参照．

定理 2.6 （一時的な状態の極限確率）

状態空間 S 上の推移確率行列を $\boldsymbol{P}$ とする．$j \in S$ を一時的な状態とすると，任意の $i \in S$ に対して次が成り立つ．

$$\lim_{n \to \infty} p_{ij}^{(n)} = 0$$

（証明） 式 (2.3) より，

$$\sum_{n=1}^{\infty} p_{ij}^{(n)} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{n} f_{ij}^{(k)} p_{jj}^{(n-k)} = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=k}^{\infty} f_{ij}^{(k)} p_{jj}^{(n-k)} = f_{ij} \sum_{n=0}^{\infty} p_{jj}^{(n)}.$$

[6] $A_n \uparrow A \Rightarrow \lim_{n \to \infty} \mathrm{E}[A_n] = \mathrm{E}[\lim_{n \to \infty} A_n] = \mathrm{E}[A]$.

よって，定理 2.5 より，一時的であれば $\sum_{n=0}^{\infty} p_{jj}^{(n)} < \infty$ なので $\sum_{n=0}^{\infty} p_{ij}^{(n)} < \infty$ が得られ，定理の結果を得る． □

- この補題より，一時的状態の定常確率はゼロしかあり得ないことが次のようにして分かる．$\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)$ を定常分布とし，一時的状態 $j \in S$ に対して $\pi_j > 0$ であったとする．補題 2.6 より，定常分布を初期分布とする HMC $\{X_n\}$ について，十分大きな $k \geq 0$ を取ることで，
$$P(X_k = j) = \sum_{i \in S} \pi_i p_{ij}^{(k)} \leq \sum_{i \in S} p_{ij}^{(k)} < \pi_j$$
とできるが，これは $\pi_j > 0$ が定常確率であることに矛盾する．よって，$\pi_j = 0$ となる．

次の補題は再帰性がクラスの性質であることを示す．これにより，既約な集合の再帰性はその集合内の特定の状態についてチェックすればよいことが分かる．

補題 2.9 （再帰性はクラスの性質）
$i \leftrightarrow j \Rightarrow$ 状態 i と j は共に一時的か，共に正再帰的か，共に零再帰的

（証明）（共に一時的か，共に再帰的であること） $i \leftrightarrow j$ より，ある $n, m \geq 0$ に対して，$p_{ij}^{(n)} > 0,\ p_{ji}^{(m)} > 0$ とできる．この n, m について，$p_{ii}^{(n+k+m)} \geq p_{ij}^{(n)} p_{jj}^{(k)} p_{ji}^{(m)}$ for all $k \geq 0$ である．よって，$p_{ij}^{(n)}$ の n に関する母関数を $P_{ij}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n p_{ij}^{(n)}$ で与えると（ $0 < z < 1$ として），
$$P_{ii}(z) \geq p_{ij}^{(n)} z^{n+m} P_{jj}(z) p_{ji}^{(m)}. \tag{2.5}$$
が得られる．この式と定理 2.5 より，状態 i が一時的であれば右辺は $\lim_{z \uparrow 1} P_{ii}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} p_{ii}^{(n)} < \infty$ となる．よって，$p_{ij}^{(n)} > 0,\ p_{ji}^{(m)} > 0$ から，$\lim_{z \uparrow 1} P_{jj}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} p_{jj}^{(n)} < \infty$ となり，状態 j も一時的となる．逆（状態 j が一時的ならば状態 i が一時的であること）も同様にして示される．共に再帰的であることは，共に一時的であることの対偶として得られる．

（共に正再帰的か，共に零再帰的であること） 状態 i, j が再帰的であるとする．$\ell \in S$ に対して，
$$G_\ell(z) = \sum_{n=1}^{\infty} z^n \sum_{m=n}^{\infty} f_{\ell\ell}^{(m)}$$
とおくと，$\lim_{z \uparrow 1} G_i(z) = G_i(1) = \mu_{ii}$, $\lim_{z \uparrow 1} G_j(z) = G_j(1) = \mu_{jj}$ である．式 (2.4) を用いると，
$$G_i(z) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{m} z^n f_{ii}^{(m)} = \frac{z(1 - F_{ii}(z))}{1 - z} = \frac{z}{(1 - z) P_{ii}(z)}.$$
$G_j(z)$ についても同様に
$$G_j(z) = \frac{z}{(1 - z) P_{jj}(z)}.$$
が得られる．これらと式 (2.5) より，
$$p_{ij}^{(n)} z^{n+m} G_i(z) p_{ji}^{(m)} \leq G_j(z)$$
が得られる．よって，状態 j が正再帰的ならば
$$\infty > \mu_{jj} = G_j(1) \geq p_{ij}^{(n)} G_i(1) p_{ji}^{(m)} = p_{ij}^{(n)} \mu_{ii} p_{ji}^{(m)}$$
から，$\mu_{ii} < \infty$ となり，状態 i も正再帰的となる．逆（状態 i が正再帰的ならば状態 j が正再帰的であること）も同様にして示される．共に零再帰的であることは，共に正再帰的であることの対偶として得られる． □

- この補題より，既約でない集合（クラス）は一時的であることが次のようにして得られる（ただし，逆は成り立たない）．$C \subset S$ を既約でないクラスとする．既約でないことから，ある $i \in C$ に対して，ある $j \notin C$ が存在し，$p_{ij} > 0$ とできる．さらに，この i, j に対して，$p_{ji}^{(n)} = 0$ for all $n \geq 0$ が成り立つ.（なぜなら，そうでないとすると $i \leftrightarrow j$ となり，$j \notin C$ に反する.）これは，$f_{ji} = 0$ を意味する．よって，状態 i の再帰確率 f_{ii} は
$$f_{ii} = p_{ii} + \sum_{k \neq i} p_{ik} f_{ki} \leq p_{ii} + \sum_{k \neq i, j} p_{ik} = 1 - p_{ij} < 1$$
となり，状態 i は一時的となる．従って，C の要素は全て一時的となる．
- 以上より，既約な集合に含まれない状態の定常確率および極限確率はともにゼロとなることが分かる．

2.3 再帰的なマルコフ連鎖

今までの考察により，状態が一時的であれば，定常確率と極限確率がともにゼロとなることが分かった．また，状態空間は幾つかのクラスに分割され，そのなかで既約でないクラスは一時的であることも分かった．よって，次の課題は再帰的で既約な集合（クラス）についての解析となる．

ところで，$C \subset S$ を既約な集合（クラス）とし，C に属する状態間の推移確率を要素とする行列を $\tilde{\boldsymbol{P}} = (\tilde{p}_{ij})$ とすると，既約な集合の定義より，$\tilde{\boldsymbol{P}}$ は確率行列となる．そこで，$\tilde{\boldsymbol{P}}$ に定常分布 $\tilde{\boldsymbol{\pi}} = (\tilde{\pi}_j)$ が存在すると仮定し，それを S 上へ拡大したものを $\boldsymbol{\pi} = (\pi_j)$（$j \in C$ ならば $\pi_j = \tilde{\pi}_j$, $j \notin C$ ならば $\pi_j = 0$）とする．この時，$\boldsymbol{\pi}$ は定常方程式 $\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\pi}$ を満たすので元の HMC の定常分布となる．同様なことは全ての既約な集合に対しても成り立ち，元の HMC の定常分布はそれら既約な集合に関する拡大された定常分布の線形結合（ただし，係数は非負で和が 1）であることも分かる．これより，既約な集合に関する解析はその部分のみを取り出し行えばよいことが分かる．よって，以下では既約な HMC に限定して解析を進めていく．

この小節では，正再帰的であることが定常分布の存在する必要十分条件であることを示す．そのために定常分布の総和が 1 であるという条件を緩めた概念である不変測度を用いる．

2.3.1 不変測度

不変測度とは定常方程式を満たすゼロでない非負ベクトルであり，定常分布は正規化された（総和が 1 となるように調整された）不変測度とみることができる．そこで，以下では，不変測度の存在と正規化の可能性について調べることで，定常分布の存在する条件を求めていく．解析のポイントは，不変測度が各状態への平均訪問回数として表せることにある．

定義 2.11 （不変測度） 状態空間 S 上の確率行列を $\boldsymbol{P} = (p_{ij})$ とする．S 上の非ゼロベクトル $\boldsymbol{x} = (x_i)$ $(\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0})$ が任意の $i \in S$ に対して，条件 $x_i \in [0, \infty)$ と

$$x_i = \sum_{j \in S} x_j p_{ji} \tag{2.6}$$

を満たす時，$\boldsymbol{x}$ を $\boldsymbol{P}$ の**不変測度 (invariant measure)** という．

補題 2.10 （平均訪問回数による不変測度の表現）

状態空間 S 上の既約で再帰的な *HMC* $\{X_n\}$ の推移確率行列を $\boldsymbol{P} = (p_{ij})$ とする．各状態 $i \in S$ に対して，状態 0 から出発して状態 0 に戻るまでに状態 i を訪問した回数の期待値を x_i とする．すなわち，T_0 を状態 0 の再帰時間として，

$$x_i = E\left[\sum_{n=1}^{T_0} 1_{\{X_n = i\}} \,\middle|\, X_0 = 0\right] = E\left[\sum_{n=1}^{\infty} 1_{\{X_n = i\}} 1_{\{n \le T_0\}} \,\middle|\, X_0 = 0\right]. \tag{2.7}$$

この時，$\boldsymbol{x} = (x_i)$ は $\forall i \in S,\ x_i \in (0, \infty)$ を満たす不変測度となる．

（証明）（式 (2.6) を満たすこと） まず，$n = T_0$ の時に限り $X_n = 0$ となり，再帰的であることの仮定より，

$$x_0 = P(T_0 < \infty \,|\, X_0 = 0) = 1$$

である．次に，

$${}_0p_{0i}^{(n)} = \mathrm{E}[1_{\{X_n = i\}} 1_{\{n \le T_0\}} \,|\, X_0 = 0] = P(X_1 \neq 0, ..., X_{n-1} \neq 0, X_n = i \,|\, X_0 = 0) \tag{2.8}$$

と定義すると，単調収束定理より

$$x_i = \sum_{n=1}^{\infty} {}_0p_{0i}^{(n)}$$

となる．この ${}_0p_{0i}^{(n)}$ について，$n = 1$ ならば ${}_0p_{0i}^{(1)} = p_{0i}$ である．$n \ge 2$ ならば，時点 $n-1$ での状態を条件として条件付確率を考えることで，

$${}_0p_{0i}^{(n)} = \sum_{j \neq 0} {}_0p_{0j}^{(n-1)} p_{ji}$$

を得る．よって，$n \ge 1$ についてこれらの式の和をとることで，

$$x_i = p_{0i} + \sum_{j \neq 0} x_j p_{ji}$$

が得られる．$x_0 = 1$ なのでこの式は式 (2.6) を示している．

（$x_i > 0$ であること） 式 (2.6) を満たすことより，$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}\boldsymbol{P}^n$ が得られる．これと $x_0 = 1$ より，n ステップ推移確率に対しても，

$$x_i = p_{0i}^{(n)} + \sum_{j \neq 0} x_j p_{ji}^{(n)}$$

が成り立つ．ここで，ある $i \neq 0$ に対して $x_i = 0$ と仮定すると，$\forall n \geq 1, p_{0i}^{(n)} = 0$ となり，既約であることに矛盾する．よって，$\forall i \in S, x_i > 0$ である．

（$x_i < \infty$ であること） $x_i > 0$ であることの証明と同様にして，

$$1 = x_0 = \sum_{j \in S} x_j p_{j0}^{(n)}$$

が得られる．既約であることから，任意の $j \in S$ に対してある $n \geq 0$ が存在して $p_{j0}^{(n)} > 0$ となる．よって，$x_j = \infty$ と仮定すると矛盾が生じることから，$\forall j \in S, x_j < \infty$ となる． □

- 既約な HMC を対象としているので，この定理の結果は状態 0 を他の任意の状態に置き換えても成り立つ．

単調収束定理より，

$$\sum_{i \in S} \sum_{n=1}^{\infty} 1_{\{X_n = i\}} 1_{\{n \leq T_0\}} = \sum_{n=1}^{\infty} 1_{\{n \leq T_0\}} = T_0$$

が得られる．これより，次の関係式が得られる．

$$\sum_{i \in S} x_i = \sum_{i \in S} \mathrm{E}\left[\sum_{n=1}^{\infty} 1_{\{X_n = i\}} 1_{\{n \leq T_0\}} \,\middle|\, X_0 = 0\right] = \mathrm{E}[T_0 \mid X_0 = 0] = \mu_{00}. \tag{2.9}$$

この式は，HMC の正再帰性と不変測度の正規化について考えるための基本的な式となる．次の補題は，既約で再帰的な HMC の不変測度の一意性を述べたものであり，定常分布の一意性につながる性質である．

補題 2.11 （不変測度の一意性）
既約で再帰的な *HMC* の推移確率行列 $\boldsymbol{P} = (p_{ij})$ の不変測度は，定数倍を除いて一意である．

（証明） $\boldsymbol{y} = (y_i)$ を任意の不変測度とし，これが補題 2.10 の不変測度 $\boldsymbol{x} = (x_i)$ とある $i \in S$ に対して $\boldsymbol{x} = \frac{1}{y_i}\boldsymbol{y}$ の関係にあることを示す．

$\boldsymbol{y} = (y_i)$ が不変測度であることより，少なくともひとつ正の要素（$y_k > 0$ とする）が存在する．この y_k を x_0 の代わりに用いることで，補題 2.10 における $x_i > 0$ であることの証明と同様な方法により，$\forall i \in S,\ y_i > 0$ が得られる．そこで，行列 $\boldsymbol{Q} = (q_{ij})$ を

$$q_{ij} = \frac{y_j}{y_i} p_{ji}$$

で定義すると，$\boldsymbol{Q}$ は確率行列となり，その n ステップ推移確率に対しても

$$q_{ij}^{(n)} = \frac{y_j}{y_i} p_{ji}^{(n)}$$

が成り立つ．この式を用い，$\boldsymbol{P}$ が既約であることから $\boldsymbol{Q}$ も既約であることが得られる．さらに，この式と補題 2.5（一時的あることの必要十分条件）より，$\boldsymbol{P}$ が再帰的であることから $\boldsymbol{Q}$ も再帰的であることが分かる．

${}_0p_{0i}^{(n)}$ を $\boldsymbol{P}$ に関して補題 2.10 の証明で定義した確率とし，$g_{ij}^{(n)}$ を $\boldsymbol{Q}$ に関する初到達時間の確率関数とする．${}_0p_{0i}^{(n)}$ は次の関係式を満たした．

$${}_0p_{0i}^{(n+1)} = \sum_{j \neq 0} {}_0p_{0j}^{(n)} p_{ji}.$$

また，初到達時間の確率関数は次の関係式を満たす．

$$g_{i0}^{(n+1)} = \sum_{j \neq 0} q_{ij} g_{j0}^{(n)}$$

これより，$y_0\,{}_0p_{0i}^{(n)}$ と $y_i g_{i0}^{(n)}$ は $n \geq 1$ に対して次の同等な再帰式を満たすことが分かる．

$$(y_0\,{}_0p_{0i}^{(n+1)}) = \sum_{j \neq 0} (y_0\,{}_0p_{0j}^{(n)}) p_{ji},$$

$$(y_i g_{i0}^{(n+1)}) = \sum_{j \neq 0} (y_j g_{j0}^{(n)}) p_{ji}.$$

よって，両者の初期値が等しい（$y_0\,{}_0p_{0i}^{(1)} = y_0\,p_{0i} = y_i q_{i0} = y_i g_{i0}^{(1)}$）ことより，任意の $n \geq 1$ に対して

$$ {}_0p_{0i}^{(n)} = \frac{y_i}{y_0} g_{i0}^{(n)} $$

が成り立つ．$\boldsymbol{Q}$ は再帰的であることから，両辺の和を取ることで

$$ x_i = \sum_{n=1}^{\infty} {}_0p_{0i}^{(n)} = \frac{y_i}{y_0} \sum_{n=1}^{\infty} g_{i0}^{(n)} = \frac{y_i}{y_0} $$

を得る． □

補題 2.10 と補題 2.11 より，既約で再帰的であれば $\boldsymbol{x} > \boldsymbol{0}$ の不変測度が存在し，定数倍を除いて一意であることが分かる．ただし，逆は成り立たない[7]．次の補題は，既約で再帰的な HMC が正再帰的であるための必要十分条件を不変測度により表したものである．

補題 2.12 （不変測度と再帰性）
状態空間 S 上の既約で再帰的な *HMC* $\{X_n\}$ の推移確率行列 $\boldsymbol{P}$ の不変測度を $\boldsymbol{x} = (x_i)$ とする．この時，

$$ \{X_n\} \text{ が正再帰的} \Leftrightarrow \sum_{i \in S} x_i < \infty. $$

（証明） 不変測度の一意性（補題 2.11）より，補題 2.10 で与えた不変測度についてのみ考えればよい．ところで，式 (2.9) より $\sum_{i \in S} x_i = \mu_{00}$ なので，再帰性がクラスの性質（補題 2.9）であることを考えあわせて，定理の条件は正再帰的であるための必要十分条件に他ならない． □

2.3.2 正再帰的な HMC

応用面から最も重要なモデルのクラスが正再帰的な HMC であり，その定常分布に関して次の定理が成り立つ．

定理 2.7 （正再帰的であるための必要十分条件） 既約な *HMC* について，正再帰的であることと定常分布が存在することは同値である．さらに，定常分布 $\boldsymbol{\pi}$ が存在すれば，それは一意的でかつ $\boldsymbol{\pi} > \boldsymbol{0}$ である．

（証明）（正再帰的 ⇒ 定常分布が存在） 補題 2.10 と補題 2.12 より，正再帰的ならば不変測度 $\boldsymbol{x} = (x_i)$ が存在し，$\sum_{i \in S} x_i < \infty$ となる．よって，

$$ \boldsymbol{\pi} = \frac{1}{\sum_{i \in S} x_i} \boldsymbol{x} $$

とおけば $\boldsymbol{\pi}$ は定常分布となる．

（定常分布が存在 ⇒ 正再帰的） $\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)$ を定常分布とすると，$\forall i \in S,\ \forall n \geq 0,\ \boldsymbol{\pi}_i = \sum_{i \in S} \boldsymbol{\pi}_j p_{ji}^{(n)}$ が成り立つ．ここで，一時的であると仮定すると，定理 2.6 より，$\lim_{n \to \infty} p_{ji}^{(n)} = 0$ となる．よって，有界収束定理より，全ての $i \in S$ に対して

$$ \boldsymbol{\pi}_i = \lim_{n \to \infty} \sum_{i \in S} \boldsymbol{\pi}_j p_{ji}^{(n)} = \sum_{i \in S} \lim_{n \to \infty} \boldsymbol{\pi}_j p_{ji}^{(n)} = 0 $$

となり矛盾が生じる．よって，対象とする HMC は再帰的である．定常分布は要素の総和が 1 の不変測度なので，定理 2.12 より，この HMC は正再帰的となる．

（定常分布の一意性と $\pi > 0$ であること） 定常分布が存在すれば再帰的なので，補題 2.11 より $\boldsymbol{P}$ の不変測度は全て定常分布の定数倍となる．よって，定常分布は一意的であり，補題 2.10 より，$\boldsymbol{\pi} > \boldsymbol{0}$ である． □

状態数が有限なマルコフ連鎖を**有限マルコフ連鎖 (finite Markov chain)** といい，応用上重要なモデルのクラスを形成する．有限マルコフ連鎖が定常分布を持つかどうかのチェックは既約性のチェックのみでよいことが次の補題から分かる．

補題 2.13 （有限状態 HMC の正再帰性）
既約で状態数が有限な *HMC* は正再帰的であり，常に定常分布が存在する．

（証明） 状態空間を $S = \{0, 1, ..., M\}$ とおく．一時的であると仮定すると，定理 2.6 より，

$$ 1 = \lim_{n \to \infty} \sum_{j=0}^{M} p_{ij}^{(n)} = 0 $$

[7] 既約で一時的な HMC に対して不変測度が存在する場合がある．(例：ゼロを境界とする $\mathcal{Z}^+$ 上のランダムウォークで，$P(X_1 = i+1 \,|\, X_0 = i) > P(X_1 = i-1 \,|\, X_0 = i) = 1 - q$ を満たすもの.)

となり，矛盾が生じる．よって，再帰的である．既約で再帰的なので補題 2.10 より，不変測度 $\boldsymbol{x} = (x_i) > \boldsymbol{0}$ が存在する．状態数が有限なので $\sum_{i=0}^{M} x_i < \infty$ となる．これより，正再帰的（補題 2.12）であり，定常分布が存在する（定理 2.7）ことが分かる． □

以上では，再帰性と定常分布の存在の関係について見てきたが，定常確率と平均再帰時間の間には次の関係がある．

> **補題 2.14 （定常分布と再帰時間）**
> 既約で正再帰的な *HMC* では，任意の $i \in S$ に対して
> $$\pi_i = \frac{1}{\mu_{ii}}. \tag{2.10}$$

（証明） 既約で正再帰的であることから，定理 2.10 の不変測度を $\boldsymbol{x}$ とすると，$\boldsymbol{xe} < \infty$ が得られる．よって，式 (2.9) を用いて，

$$\pi_0 = \frac{x_0}{\boldsymbol{xe}} = \frac{1}{\mu_{00}}$$

となる．この式は状態 0 を他のどの状態 i に置き換えても成り立つので補題の結果が得られる． □

2.4 極限分布

推移確率行列 $\boldsymbol{P} = (p_{ij})$ を持つ状態空間 S（可算）上の既約な HMC $\{X_n\}$ の状態分布を $\boldsymbol{a}(n) = \boldsymbol{a}\boldsymbol{P}^n$ とする[8]．この小節の課題は，$\boldsymbol{a}(n)$ の極限分布について考察することであり，再帰性と周期性がそのための基本的な概念となる．

結論を簡単にまとめると次のようになる．初めに，$\{X_n\}$ が一時的であれば，任意の $j \in S$ に対して，どのような初期分布 $\boldsymbol{a}$ を持ってきても，定理 2.6 と有界収束定理より，

$$\lim_{n\to\infty} a_j(n) = \lim_{n\to\infty} \sum_{i\in S} a_i p_{ij}^{(n)} = \sum_{i\in S} a_i \lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)} = 0$$

となり，この場合は既に結果が得られている．次に，$\{X_n\}$ が零再帰的であれば極限確率はゼロに収束し，一時的な場合と同様の結果が得られる（これについてはこの小節で厳密に示す）．

最も重要なモデルのクラスは，$\{X_n\}$ が正再帰的で非周期的な場合であり，このとき，任意の初期分布に対して $\boldsymbol{a}(n)$ は定常分布に収束することが示される．$\{X_n\}$ が周期的（周期 $r > 1$）であれば，定理 2.2 で示したように，状態空間 S は r 個の周期クラスに分割され，$\{X_n\}$ は 1 ステップ毎に周期クラスを巡っていく．よって，周期的な場合は正再帰的であっても（定常分布は存在するが），極限分布は存在しないことが直ちに分かる．しかし，周期的な場合についても周期 r の整数倍の時点をとることである種の極限定理を得ることができる．

以下では，まず，分布の収束を議論するために，全変動距離 (total variation distance) という分布間の距離を導入する．次に，二つの確率過程のサンプルパスがある時点以降一致することを表すカップリング (coupling) という概念を導入する．カップリングするまでの時間をカップリング時間というが，二つの確率過程の状態分布の全変動距離はカップリング時間の補分布で上から押さえることができる（カップリング不等式）．HMC の状態分布の収束は，このカップリング不等式を用いて導出される．

2.4.1 分布間の距離

定義 2.12 （全変動距離） 状態空間 S 上の確率ベクトル $\boldsymbol{a} = (a_i)$ と $\boldsymbol{b} = (b_i)$ の**全変動距離 (total variation distance)** $d(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$ を次で与える．

$$d(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = \frac{1}{2} \sum_{i\in S} |a_i - b_i| \tag{2.11}$$

- 式 (2.11) の d は任意の確率ベクトルに対して定義され，距離の公理を満たす.（確認せよ）
- 式 (2.11) の右辺には係数 $\frac{1}{2}$ が付いているので，$0 \le d(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) \le 1$ を満たす．$d(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = 0$ については，

  $$d(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{a} = \boldsymbol{b} \text{ (elementwise)}$$

  という関係を後に分布の収束判定に用いる．$d(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = 1$ は，$\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ において確率が正となる状態の集合が交わりを持たないことを示している．

[8] 容易に分かるように，ある既約な集合から始まった過程が他の既約な集合に移る確率はゼロである．よって，この小節では既約な HMC のみを扱う．

- S に値を取る確率変数 X と Y の分布間の全変動距離も同じ記号を用いて表すことにする．すなわち，

$$d(X,Y) = \frac{1}{2}\sum_{i\in S}|P(X=i)-P(Y=i)|.$$

このとき，次が成り立つ[9]．

$$d(X,Y)=0 \Leftrightarrow X =_d Y$$

次の補題は，特定の事象に対する確率の差が全変動距離になることを示したものである．

補題 2.15 S に値を取る確率変数 X と Y の分布間の全変動距離は次で与えられる．

$$\sup_{A\subset S}|P(X\in A)-P(Y\in A)| = \sup_{A\subset S}\{P(X\in A)-P(Y\in A)\} = d(X,Y).$$

（証明） 任意の $A\subset S$ に対して，$B=A$ または $B=A^C$ と置くことで，

$$|P(X\in A)-P(Y\in A)| = P(X\in B)-P(Y\in B)$$

とできることから，前半の等式が得られる．

$P(X\in A)-P(Y\in A)$ の値を最大にする $A\subset S$ は，

$$A^* = \{i\in S \,|\, P(X=i) > P(Y=i)\}$$

で与えられる．また，この A^* に対して，

$$\sum_{i\in A^*}|P(X=i)-P(Y=i)| = -\sum_{i\in(A^*)^C}\{P(X=i)-P(Y=i)\} = \sum_{i\in(A^*)^C}|P(X=i)-P(Y=i)|$$

である．よって，$S = A^*\cup(A^*)^C$ より，

$$\sup_{A\subset S}\{P(X\in A)-P(Y\in A)\} = \sum_{i\in A^*}|P(X=i)-P(Y=i)| = \frac{1}{2}\sum_{i\in S}|P(X=i)-P(Y=i)| = d(X,Y)$$

となり，後半の等式が得られる． □

2.4.2 カップリング

定義 2.13 （カップリング） 状態空間 S 上の確率過程 $\{X_n^{(1)}\}$ と $\{X_n^{(2)}\}$ が**カップリング (coupling)** するとは，確率 1 で有限な確率変数 τ が存在して，時点 τ 以降，両確率過程が同じ状態を取る，即ち，

$$X_n^{(1)} = X_n^{(2)},\ n\geq\tau,$$

を満たすことをいう．この τ を**カップリング時間 (coupling)** という．

次の補題は，分布の収束を考える上で基本となる式である．

補題 2.16 （カップリング不等式）
τ を確率過程 $\{X_n^{(1)}\}$ と $\{X_n^{(2)}\}$ のカップリング時間とすると，次の不等式が成り立つ．

$$d(X_n^{(1)}, X_n^{(2)}) \leq P(\tau > n),\ n\geq 0 \tag{2.12}$$

（証明） 任意の $n\geq 0$, 任意の $A\subset S$ に対して，τ がカップリング時間であることから，

$$\begin{aligned}
&P(X_n^{(1)}\in A) - P(X_n^{(2)}\in A)\\
&= P(X_n^{(1)}\in A,\, n<\tau) + P(X_n^{(1)}\in A,\, n\geq\tau) - \{P(X_n^{(2)}\in A,\, n<\tau) + P(X_n^{(2)}\in A,\, n\geq\tau)\}\\
&= P(X_n^{(1)}\in A,\, n<\tau) - P(X_n^{(2)}\in A,\, n<\tau)\\
&\leq P(X_n^{(1)}\in A,\, n<\tau)\\
&\leq P(n<\tau)
\end{aligned}$$

が得られる．よって，補題 2.15 より，式 (2.12) が得られる． □

[9] $X =_d Y$ は X と Y の分布が等しいことを表す．

2.4.3 エルゴード的な HMC の極限定理

定義 2.14（エルゴード的な HMC） 既約で正再帰的で非周期的な HMC，または，その推移確率行列を**エルゴード的** (ergodic) という．

初期分布を定常分布としたエルゴード的な HMC を $\{X_n\}$ とする．もし，任意の初期分布から開始された HMC $\{X'_n\}$ で，$\{X_n\}$ とカップリングするものが構成できれば，カップリング不等式により，$\{X'_n\}$ の状態分布と定常分布間の全変動距離を評価することができる．以下の補題は，そのような HMC が構成できることを示したものである．

補題 2.17（カップリングするマルコフ連鎖の構成）
状態空間 S 上のエルゴード的（既約で正再帰的で非周期的）な推移確率行列を $\boldsymbol{P} = (p_{ij})$ とする．$\boldsymbol{P}$ を推移確率行列とし， 初期分布がそれぞれ $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ である独立な *HMC* を $\{X_n^{(1)}\}$ と $\{X_n^{(2)}\}$ とする．これに対し，$\{X_n^{(3)}\}$ を次で与える．

$$\tau = \inf\{n \geq 0 \,|\, X_n^{(1)} = X_n^{(2)}\}, \quad X_n^{(3)} = \begin{cases} X_n^{(2)} & \text{if } n \leq \tau \\ X_n^{(1)} & \text{if } n \geq \tau \end{cases}.$$

このとき，τ は確率 1 で有限であり，$\{X_n^{(1)}\}$ と $\{X_n^{(3)}\}$ は τ をカップリング時間としてカップリングする．さらに，$\{X_n^{(3)}\}$ は推移確率行列を $\boldsymbol{P}$，初期分布を $\boldsymbol{b}$ とする *HMC* であり，$\{X_n^{(2)}\}$ と $\{X_n^{(3)}\}$ は任意の時点において同じ状態分布を持つ．

（証明） 証明のポイントは，状態空間 S^2 上の 2 次元確率過程 $\{Z_n\}$, $Z_n = (X_n^{(1)}, X_n^{(2)})$, $n \geq 0$, を考え，τ を $\{Z_n\}$ の初到達時間として捉える点にある．$\{Z_n\}$ が既約で正再帰的な HMC であることが示せれば，S が可算であることから S^2 も可算となり，前小節までの結果が $\{Z_n\}$ に適用できる．

まず，$\{X_n^{(1)}\}$ と $\{X_n^{(2)}\}$ が独立な HMC であることから，$\{Z_n\}$ は HMC となり，その推移確率は

$$P(Z_{n+1} = (j,\ell) \,|\, Z_n = (i,k)) = p_{ij}p_{k\ell},\ (i,k),(j,\ell) \in S^2 \tag{2.13}$$

で与えられる．$\boldsymbol{P}$ が既約で非周期的あることから補題 2.4 より，任意の $(i,j),(k,\ell) \in S^2$ に対してある $m \geq 1$ が存在して，

$$p_{ij}^{(n)} p_{k\ell}^{(n)} > 0,\ n \geq m,$$

となる.（補題 2.4 はこのような m が各々の HMC に対して存在することを示しているので，その大きい方を取ればよい．この部分の証明で非周期性が使われている点に注意.）よって，$\{Z_n\}$ も既約（かつ，非周期的）となる．

次に，$\boldsymbol{P}$ が既約で正再帰的であることから，$\boldsymbol{P}$ の定常分布が存在する．それを $\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)$ とすると，式 (2.13) より，$(\pi_i\pi_j,\ (i,j) \in S^2)$ は定常方程式を満たす確率ベクトルであることが分かり，$\{Z_n\}$ の定常分布となる．よって，$\{Z_n\}$ は既約で定常分布が存在することから，定理 2.7 より正再帰的であることが分かる．τ は $\{Z_n\}$ が集合 $A = \{(i,i) \,|\, i \in S\}$ に初めて到達するまでの時間（初到達時間）であり，$\{Z_n\}$ が再帰的であることから $P(\tau < \infty) = 1$ となる.（集合 A への初到達時間は，確率 1 で状態 $(0,0)$ への初到達時間以下となることを考えればよい.）

τ は $\{Z_n\}$ の停止時間でもあるので，強マルコフ性より，$\{Z_n\}$ は τ 以降も同じ推移確率行列に支配された HMC となる．これより，τ 以降の $\{X_n^{(1)}\}$ は（よって $\{X_n^{(3)}\}$ も）$\boldsymbol{P}$ を推移確率行列とする HMC となる．定義より，$\{X_n^{(3)}\}$ の初期分布は $\boldsymbol{b}$ である． □

次の定理は，エルゴード的な HMC の状態分布が定常分布に収束することを示すものである．この定理により，任意の初期分布から開始された HMC の状態分布は，十分時間が経過した後は定常分布と見なしてよいことが分かる．

定理 2.8（エルゴード的な HMC の極限定理）
$\boldsymbol{P}$ を，状態空間 S 上のエルゴード的（既約で正再帰的で非周期的）な推移確率行列，$\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)$ をその定常分布とする．このとき，任意の初期分布 $\boldsymbol{a} = (a_i)$, $\boldsymbol{b} = (b_i)$ に対して次が成り立つ．

$$\lim_{n\to\infty} d(\boldsymbol{a}(n), \boldsymbol{b}(n)) = \lim_{n\to\infty} d(\boldsymbol{a}\boldsymbol{P}^n, \boldsymbol{b}\boldsymbol{P}^n) = 0$$

よって，$a(n)$（$b(n)$ も）は全変動距離の意味で定常分布 $\boldsymbol{\pi}$ に収束し，任意の $i,j \in S$ に対して，次が成り立つ．

$$\lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)} = \pi_j \tag{2.14}$$

（証明） 推移確率行列を $\boldsymbol{P}$ とし，初期分布をそれぞれ $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ とする独立な HMC を $\{X_n^{(1)}\}$ と $\{X_n^{(2)}\}$ とおく．補題 2.17 より，$\{X_n^{(1)}\}$ とカップリングし，推移確率行列を $\boldsymbol{P}$，初期分布を $\boldsymbol{b}$ とする HMC $\{X_n^{(3)}\}$ が構成でき，カップリング時間 τ は確率 1 で有限となる．よって，補題 2.16 より，

$$\lim_{n\to\infty} d(X_n^{(1)}, X_n^{(2)}) = \lim_{n\to\infty} d(\boldsymbol{a}(n), \boldsymbol{b}(n)) = \lim_{n\to\infty} d(\boldsymbol{a}\boldsymbol{P}^n, \boldsymbol{b}\boldsymbol{P}^n) = \lim_{n\to\infty} d(X_n^{(1)}, X_n^{(3)}) \leq \lim_{n\to\infty} P(\tau > n) = 0$$

が得られる．

$\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ は任意であることから，$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{\pi}$ と置くことで

$$\lim_{n\to\infty} d(\boldsymbol{a}\boldsymbol{P}^n, \boldsymbol{\pi}) = 0$$

が得られる．この式で，$a_i = 1,\ a_k = 0,\ k \neq i,$ と置くことで式 (2.14) が得られる． □

- この定理より，$\boldsymbol{P}^n$ は各列が $\boldsymbol{\pi}$ である行列に収束することが分かる．すなわち，

$$\lim_{n\to\infty} \boldsymbol{P}^n = \boldsymbol{e}\,\boldsymbol{\pi}.$$

2.4.4　既約で零再帰的な HMC の極限定理

既約で零再帰的な HMC の極限確率はゼロに収束することが，次の定理より得られる．

定理 2.9 （既約で零再帰的な HMC の極限定理）
状態空間 S 上の既約で零再帰的な推移確率行列を $\boldsymbol{P} = (p_{ij})$ とする．このとき，任意の $i, j \in S$ に対して次が成り立つ．

$$\lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)} = 0. \tag{2.15}$$

（証明） 周期的な場合は，後に示す定理 2.10 のように，ひとつの周期クラスに注目することで非周期的な場合に帰着される．よって，ここでは非周期的な場合のみを証明する．証明は，補題 2.17 と同様に，2 次元確率過程 $\{Z_n\}$ を構成して進められる．

$\boldsymbol{P}$ を推移確率行列とし， 初期分布がそれぞれ $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ である独立な HMC を $\{X_n^{(1)}\}$ と $\{X_n^{(2)}\}$ とする．さらに，状態空間 S^2 上の 2 次元確率過程 $\{Z_n\}$ を $Z_n = (X_n^{(1)}, X_n^{(2)}),\ n \geq 0,$ によって定義する．補題 2.17 と同様，$\boldsymbol{P}$ が既約で非周期的なことから，この $\{Z_n\}$ は既約で非周期的な HMC となる．しかし，$\boldsymbol{P}$ が零再帰的で定常分布を持たないため，$\{Z_n\}$ が再帰的であるかどうかは分からない．そこで，一時的な場合と再帰的な場合に分けて考える．

初めに，$\{Z_n\}$ が一時的な場合を考える．任意の $i, j \in S$ に対して，状態 (i, i) から (j, j) への n ステップ推移確率は $(p_{ij}^{(n)})^2$ で与えられる．よって，状態 (j, j) が一時的なことから，定理 2.6 より，

$$\lim_{n\to\infty} (p_{ij}^{(n)})^2 = 0$$

が得られる．これは定理の結果を示している．

次に，$\{Z_n\}$ が再帰的な場合について背理法により証明する．まず，

$$\lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)} = 0$$

を満たさないような $i, j \in S$ が存在したと仮定する．このとき，ある時点列を考えることで，

$$\lim_{k\to\infty} p_{ij}^{(n_k)} = x_j > 0 \text{ and } \lim_{k\to\infty} p_{i\ell}^{(n_k)} = x_\ell \in [0, 1],\ \ell \neq j,$$

とすることができる．(有界ではあるが，極限の存在が保証されていないので，時点列 $\{n_k\}$ を考える．) また，$\{Z_n\}$ が再帰的であることから定理 2.8 の証明と同様に，i を初期状態とする HMC とその 1 ステップ後の状態分布を初期分布とする HMC を比較することで，

$$\lim_{k\to\infty} |p_{i\ell}^{(n_k)} - p_{i\ell}^{(n_k+1)}| = 0$$

を得る．この式と，$p_{i\ell}^{(n_k+1)} = \sum_{s\in S} p_{is}^{(n_k)} p_{s\ell}$ より，有界収束定理を用いて，

$$x_\ell = \sum_{s\in S} x_s p_{s\ell}$$

を得る．よって，$\boldsymbol{x} = (x_\ell, \ell \in S)$ は $\boldsymbol{P}$ の不変測度となる．任意の $n \geq 0$ に対して，$\sum_{\ell\in S} p_{i\ell}^{(n)} \leq 1$ なので，$\sum_{\ell\in S} x_\ell \leq 1$ が得られる．定理 2.7 より，これは $\boldsymbol{P}$ が正再帰的であることを示しており，仮定に矛盾し，定理の結果が得られる． □

2.4.5 既約で正再帰的で周期的な HMC の極限定理

極限定理に入る前に，周期的なマルコフ連鎖の定常分布について考える．

例 2.7 例 2.1 の周期的である既約なクラス $S_2 = \{3,4,5,6\}$（周期は $r=2$）のみを取り出して考える．その推移確率行列を改めて $\boldsymbol{P}$ とすると，その周期倍（2 倍）の行列は次のようになる．

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{3}{5} & \frac{2}{5} \\ 0 & 0 & \frac{1}{10} & \frac{9}{10} \\ \frac{3}{10} & \frac{7}{10} & 0 & 0 \\ \frac{2}{5} & \frac{3}{5} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{P}^2 = \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{Q}}_{C_1} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \tilde{\boldsymbol{Q}}_{C_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{17}{50} & \frac{33}{50} & 0 & 0 \\ \frac{39}{100} & \frac{61}{100} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \\ 0 & 0 & \frac{3}{10} & \frac{7}{10} \end{pmatrix}.$$

ここで，$\boldsymbol{P}$ の周期クラス $C_1 = \{3,4\}$ と $C_2 = \{5,6\}$ は，$\boldsymbol{Q}$ では既約なクラスとなっていることが分かる．ところで，$\boldsymbol{P}$ の定常分布 $\boldsymbol{\pi}$ は次で与えられた．

$$\boldsymbol{\pi} = \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{x}}_{C_1} & \tilde{\boldsymbol{x}}_{C_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{13}{70} & \frac{11}{35} & \frac{1}{7} & \frac{5}{14} \end{pmatrix}$$

そこで，$\tilde{\boldsymbol{x}}_{C_1}$ と $\tilde{\boldsymbol{x}}_{C_2}$ を周期倍（2 倍）したものを

$$\tilde{\boldsymbol{\pi}}_{C_1} = \begin{pmatrix} \frac{13}{35} & \frac{22}{35} \end{pmatrix}, \quad \tilde{\boldsymbol{\pi}}_{C_2} = \begin{pmatrix} \frac{2}{7} & \frac{5}{7} \end{pmatrix}$$

とすると，これらは $\tilde{\boldsymbol{Q}}_{C_1}$ と $\tilde{\boldsymbol{Q}}_{C_2}$ の定常分布になっていることが分かる．

以下では，この例の $\tilde{\boldsymbol{Q}}_{C_1}$ のように，$\boldsymbol{P}$ の要素の内，クラス C_k に含まれる状態間の推移確率だけを取り出したものを，$\boldsymbol{P}$ の C_k への制限と呼ぶ．同様な定義は確率ベクトルに対しても用いる．例で示した関係は，一般の既約で正再帰的で周期的な HMC について成り立つことが次の補題から分かる．

> **補題 2.18 （既約で再帰的で周期的な HMC の定常分布）**
> 状態空間 S 上の既約で正再帰的で周期的（周期 $r>1$）な推移確率行列を $\boldsymbol{P} = (p_{ij})$ とし，その定常分布を $\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)$, 周期クラスを $C_k, k = 0,1,...,r-1,$ とする．このとき，$\boldsymbol{Q} = (q_{ij}) = \boldsymbol{P}^r$ と置き，$\tilde{\boldsymbol{Q}}_{C_k}$ を $\boldsymbol{Q}$ の C_k への制限とすると，$\tilde{\boldsymbol{Q}}_{C_k}$ は既約で正再帰的で非周期的な確率行列となる．（これは，C_k が $\boldsymbol{Q}$ に関して既約で正再帰的で非周期的なクラスであることを表す.）そこで，$\tilde{\boldsymbol{\pi}}_{C_k}$ を $\tilde{\boldsymbol{Q}}_{C_k}$ の定常分布とし，$\tilde{x}_{C_k}$ を $\boldsymbol{\pi}_k$ の C_k への制限とすると，両者には次の関係式が成り立つ．
> $$\tilde{\boldsymbol{\pi}}_{C_k} = r\,\tilde{\boldsymbol{x}}_{C_k} \tag{2.16}$$

（証明） 定理 2.2 より，$\ell \in \{0,1,...,r-1\}$, $n \ge 0$ に対して次が成り立つ．

$$p_{ij}^{(nr+\ell)} = \begin{cases} \text{some nonnegative value} & \text{if } i \in C_k \text{ and } j \in C_{(k+\ell)\ mod\ r} \text{ for some } k \in \{0,1,...,r-1\} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{2.17}$$

この式で，$n=1, \ell=0$ とおくことで，

$$q_{ij} = p_{ij}^{(r)} = \begin{cases} \text{some nonnegative value} & \text{if } i,j \in C_k \text{ for some } k \in \{0,1,...,r-1\} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{2.18}$$

が得られる．また，式 (2.17) より，$k \in \{0,1,...,r-1\}$ に対して $i,j \in C_k$ ならば，i から j への n ステップ推移確率が非ゼロの値を取るのは，$n = mr$ の場合，すなわち，$p_{ij}^{(mr)} = q_{ij}^{(m)}, m \ge 0$ の場合のみである．よって，この $i,j \in C_k$ が $\boldsymbol{P}$ に関して $i \leftrightarrow j$ であることから，$\boldsymbol{Q}$ に関しても $i \leftrightarrow j$ であることが分かる．さらに，補題 2.4 より，$i \in C_k$ について，ある m_0 が存在し，任意の $m \ge m_0$ に対して $q_{ii}^{(m)} = p_{ii}^{(rm)} > 0$ である．これより，状態 i は $\boldsymbol{Q}$ に関して非周期的であり，C_k も非周期的となる．以上より，$C_k, k=0,1,...,r-1$ は $\boldsymbol{Q}$ の既約で非周期的なクラスであり，$\tilde{\boldsymbol{Q}}_{C_k}$ は既約で非周期的な確率行列となる．

式 (2.17) と単調収束定理より，$k \in \{0,1,...,r-1\}$ に対して，

$$\sum_{j \in C_{k+1}} \pi_j = \sum_{j \in C_{k+1}} \sum_{i \in S} \pi_i p_{ij} = \sum_{j \in C_{k+1}} \sum_{i \in C_k} \pi_i p_{ij} = \sum_{i \in C_k} \pi_i \sum_{j \in C_{k+1}} p_{ij} = \sum_{i \in C_k} \pi_i$$

となる．（ここで，$C_r = C_0$ とした.）これは，$\tilde{\boldsymbol{x}}_{C_{k+1}} \boldsymbol{e} = \tilde{\boldsymbol{x}}_{C_k} \boldsymbol{e}$ を表している．これと $\sum_{k=0}^{r-1} \tilde{\boldsymbol{x}}_{C_k} \boldsymbol{e} = \boldsymbol{\pi}\boldsymbol{e} = 1$ より，

$$\tilde{\boldsymbol{x}}_{C_k} \boldsymbol{e} = \frac{1}{r}$$

となる．ところで，$\boldsymbol{\pi}$ は $\boldsymbol{P}$ の定常分布なので $\boldsymbol{Q}$ の定常分布でもある．これと式 (2.18) より，$k \in \{0,1,...,r-1\}$, $j \in C_k$ に対して，

$$\pi_j = \sum_{i \in S} \pi_i q_{ij} = \sum_{i \in C_k} \pi_i q_{ij}$$

を得る．これは，定常方程式 $\tilde{\boldsymbol{x}}_{C_k} = \tilde{\boldsymbol{x}}_{C_k}\tilde{\boldsymbol{Q}}_{C_k}$ を表しており，$\tilde{\boldsymbol{x}}_{C_k}$ は $\tilde{\boldsymbol{Q}}_{C_k}$ の不変測度となる．よって，それを正規化した $\tilde{\boldsymbol{\pi}}_{C_k} = r\,\tilde{\boldsymbol{x}}_{C_k}$ は $\tilde{\boldsymbol{Q}}_{C_k}$ の定常分布となる．既約で定常分布が存在するので，$\tilde{\boldsymbol{Q}}_{C_k}$ は正再帰的である． □

この補題より，$\boldsymbol{P}^r$ を考えることで周期的な場合は非周期的な場合に帰着され，次の極限定理が得られる．

定理 2.10 （既約で正再帰的で周期的な HMC の極限定理）
状態空間 S 上の既約で正再帰的で周期的（周期 $r > 1$）な推移確率行列を $\boldsymbol{P} = (p_{ij})$ とし，$\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)$ をその定常分布とする．$C \subset S$ をひとつの周期クラスとし，$\boldsymbol{x}_C$ を $\boldsymbol{\pi}$ の C に含まれる状態以外の要素をゼロとしたベクトル，$\boldsymbol{a} = (a_i)$ を，$\sum_{i\in C} a_i = 1$ を満たす任意の初期分布とする．このとき，

$$\lim_{n\to\infty} d(\boldsymbol{a}\boldsymbol{P}^{rn}, r\boldsymbol{x}_C) = 0 \tag{2.19}$$

が成り立つ．これより，任意の $i, j \in C$ に対して次が得られる．

$$\lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(rn)} = r\pi_j \tag{2.20}$$

（証明） $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{P}^d$ とする．$\boldsymbol{Q}$ の C への制限 $\tilde{\boldsymbol{Q}}_C$ は，補題 2.18 よりエルゴード的（既約で正再帰的で非周期的）であり，$\boldsymbol{a}$ の C への制限 $\tilde{\boldsymbol{a}}_C$ はその定義より確率ベクトルとなる．また，$\boldsymbol{x}_C$ の C への制限を $\tilde{\boldsymbol{x}}_C$ として，$\tilde{\boldsymbol{Q}}_C$ の定常分布 $\tilde{\boldsymbol{\pi}}_C$ は $\tilde{\boldsymbol{\pi}}_C = r\,\tilde{\boldsymbol{x}}_C$ で与えられる．よって，定理 2.8 より，

$$\lim_{n\to\infty} d(\tilde{\boldsymbol{a}}_C\tilde{\boldsymbol{Q}}_C^n, r\tilde{\boldsymbol{x}}_C) = 0$$

が得られるが，これは定理の最初の式における非ゼロ要素についての関係を示している．後の方の式は，$a_i = 1$, $a_\ell = 0$, $\ell \neq i$ とおいて得られる． □

3　連続時間マルコフ連鎖

可算集合 S （特に断らない限りは $S = \{0, 1, ...\}$）を状態空間とし，時間を連続（$\mathcal{T} = [0,\ \infty)$）とした確率過程 $\{X(t)\}$ で，マルコフ性を有するものについて考えていく．この節の最終的な目標は離散時間マルコフ連鎖同様,定常分布と極限確率に関する性質を明らかにすることであるが，その前に推移確率行列 $\boldsymbol{P}(t) = (p_{ij}(t)), p_{ij}(t) = P(X(t) = j \mid X(0) = i)$ の微分方程式による表現と，$\{X(t)\}$ の隠れマルコフ連鎖による表現（離散時間マルコフ連鎖の状態推移間隔を指数分布に従う確率変数とした確率過程としての表現）を求める．

3.1　連続時間マルコフ連鎖と幾つかのモデル

3.1.1　連続時間マルコフ連鎖の定義

定義 3.1 （連続時間斉時的マルコフ連鎖） 状態空間を S とする連続時間確率過程 $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ が次の性質を満たす場合，連続時間マルコフ連鎖 (continuous-time Markov chain）という．

$$\begin{aligned}&\forall k \geq 0,\ \forall i, j, i_1, ..., i_k \in S,\ \forall s, t \geq 0, \forall s_1, ..., s_k \in [0, \infty)\ (0 \leq s_1 < ... < s_k < s),\\ &\quad P(X(t+s) = j \mid X(s) = i, X(s_k) = i_k, ..., X(s_1) = i_1) = P(X(s+t) = j \mid X(s) = i)\end{aligned} \tag{3.1}$$

この性質を**マルコフ性 (Markov property)** という．さらに，右辺の確率が時点 s に依存しない場合，**斉時的 (time homogenous)** という．

- 式 (3.1) は同時分布による表現であり，次と同値である．

  $\forall i, j \in S,\ P(X(t+s) = j \mid X(s) = i,\ X(u),\ 0 \leq u < s) = P(X(s+t) = j \mid X(s) = i)$
- 以下では斉時的であることを仮定し，

  $p_{ij}(t) = P(X(t) = j \mid X(0) = i)$

  と置く．また，連続時間斉時的マルコフ連鎖をCTMCと略記する．$p_{ij}(t)$ を**推移確率**，$\boldsymbol{P}(t) = (p_{ij}(t))$, $\boldsymbol{P}(0) = \boldsymbol{I}$ を**推移確率行列**，$\boldsymbol{a} = (a_i)$, $a_i = P(X(0) = i)$ を**初期分布**，$\boldsymbol{a}(t) = (a_i(t))$, $a_i(t) = P(X(t) = i)$ （$\boldsymbol{a}(t) = \boldsymbol{a}\boldsymbol{P}(t)$）を時点 t での**状態分布**というのは離散時間マルコフ連鎖の場合と同様である．
- CTMC の確率法則は，$\boldsymbol{a}$ と $\{\boldsymbol{P}(t)\}_{t\geq 0}$ によって決る（確認せよ）．特に，CTMC の様々な性質は $\{\boldsymbol{P}(t)\}_{t\geq 0}$ によって決る．よって，以下では，そのような場合，CTMC に対する性質と $\{\boldsymbol{P}(t)\}$ に対する性質を同等に扱う．

定理 3.1 （チャップマン・コルモゴロフの等式; Chapman-Kolmogorov equation）

$\forall s, t \geq 0,\ \boldsymbol{P}(s+t) = \boldsymbol{P}(s)\boldsymbol{P}(t)$

(要素表現は $p_{ij}(s+t) = \sum_{\ell \in S} p_{i\ell}(s) p_{\ell j}(t)$)

(証明) 全確率の定理，マルコフ性，斉時性を用いればよい. (確認せよ) □

3.1.2　CTMC であるいくつかのモデル

ここでは，CTMC の最も基本的なモデルであるポアソン過程，解析が容易でかつ重要なモデルのクラスである有限マルコフ連鎖と一様マルコフ連鎖について示す.

(1) ポアソン過程

定義 3.2 （ポアソン過程） $N(s, t]$ を区間 $(s, t]$ における事象の生起数とし，$N(t) = N(0, t]$ とする．計数過程 $\{N(t)\}_{t\geq 0}$ が次の性質を満たす時，**強度 (inteinsity)** $\lambda > 0$ の**ポアソン過程 (Poisson process)** という．

(i) 任意の $k \geq 2$ について，任意に時点を $0 \leq t_1 \leq t_2 \leq ... \leq t_k$ ととると，$N(t_i, t_{i+1}]$, $i = 1, ..., k-1$ は互いに独立．(**独立増分**）

(ii) 任意の区間 $(s, t]$ に対して，$N(s, t]$ は平均 $\lambda(t-s)$ のポアソン分布に従う．

ポアソン過程にはこの他にもいくつかの同値な定義がある．ここでは，この定義に従う確率過程が CTMC であることを確認しておく．

補題 3.1 　強度 $\lambda > 0$ のポアソン過程 $\{N(t)\}_{t\geq 0}$ は $\mathcal{N}_+$ 上の（斉時的な）*CTMC*であり，その推移確率は次で与えられる．

$$p_{ij}(t) = P(N(t) = j - i) = \begin{cases} e^{-\lambda t}\frac{(\lambda t)^{j-i}}{(j-i)!} & if\ j \geq i \\ 0 & if\ j < i \end{cases}$$

（証明）マルコフ性は独立増分から得られる．ポアソン分布であることから推移確率が得られる．強度が一定なので斉時的なことは明らか.（確認せよ） □

- この定義において，強度を時間の関数 $\lambda(t)$ として与えると非斉時的なポアソン過程となる．この時，定義の (ii) におけるポアソン分布の平均は $\int_s^t \lambda(u)du$ になる．

(2) 有限マルコフ連鎖

定義 3.3 （有限マルコフ連鎖） 状態数が有限の CTMC を（連続時間の）有限マルコフ連鎖という．

- この定義からだけでは何も言えないが，離散時間の有限マルコフ連鎖と同様，連続時間の有限マルコフ連鎖も解析的に非常に扱い易いモデルのクラスを構成する．

(3) 一様マルコフ連鎖

定義 3.4 （一様マルコフ連鎖） S を可算な状態空間とし，$\{\hat{X}_n\}_{n\geq 0}$ を S 上の斉時的な離散時間マルコフ連鎖（以下では DTMC と記す），$\boldsymbol{K} = (k_{ij})$ をその推移確率行列とする．さらに，$\{N(t)\}_{t\geq 0}$ を，$\{\hat{X}_n\}$ に独立な強度 $\lambda > 0$ のポアソン過程 とする．この時，次で与えられる確率過程 $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ を**一様マルコフ連鎖 (uniform Markov chain)** という．

$$X(t) = \hat{X}_{N(t)},\ t \geq 0$$

補題 3.2 　定義 *3.4* で与えられる一様マルコフ連鎖は状態空間 S 上の *CTMC*であり，その推移確率行列は次で与えられる．

$$\boldsymbol{P}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda t}\frac{(\lambda t)^n}{n!}\boldsymbol{K}^n,\ t \geq 0$$

（証明）一様マルコフ連鎖のマルコフ性は，それを構成するポアソン過程と DTMC のマルコフ性より得られる．推移確率は，$N(t)$ を条件とした条件付き確率を用いて得られる.（確認せよ） □

- 後に示すように，有限マルコフ連鎖は一様マルコフ連鎖として表現することができる．
- 一様マルコフ連鎖は，その意味で有限マルコフ連鎖を含む，有限マルコフ連鎖に次いで解析的に扱い易いモデルのクラスを構成する．サーバ数が有限な待ち行列モデルなど，多くのマルコフ型待ち行列はこのクラスに入る.（入らない代表的なモデルとして $M/M/\infty$ がある.）

3.2 推移速度行列とコルモゴロフの微分方程式による CTMC の特徴付け

CTMC の様々な性質は $\{\boldsymbol{P}(t)\}_{t\geq 0}$ によって決る．ここでは，解析的な方法によって $\{\boldsymbol{P}(t)\}$ の特徴付けを行う．すなわち，$\boldsymbol{P}(t)$ の推移速度行列を $\boldsymbol{Q} = \lim_{h\downarrow 0}(\boldsymbol{P}(h) - \boldsymbol{I})/h$ として定義し，$P(t)$ が満たす微分方程式 $(d/dt)\boldsymbol{P}(t) = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}(t) = \boldsymbol{P}(t)\boldsymbol{Q}$ を求める．ただし，状態数が可算な場合はいくつかの条件が必要となる．状態数が有限であれば，その微分方程式の解として $P(t) = \exp(\boldsymbol{Q}t)$ が得られる．

3.2.1 推移速度行列

ここでは，$p_{ij}(t)$ の原点における（右）微分係数を求める．ポアソン過程や一様マルコフ連鎖については推移確率が陽に与えられているので，容易にその微分係数を求めることができる．しかし，一般には次の条件が必要となる．

定義 3.5 （原点での連続性）

$$\lim_{h\downarrow 0}\boldsymbol{P}(h) = I$$

補題 3.3 （$\boldsymbol{P}(t)$ の連続性）
原点での連続性を仮定すると，任意の $t \geq 0$ に対して $\boldsymbol{P}(t)$ は連続となる．

（証明） チャップマン・コルモゴロフの等式と有界収束定理を用いればよい．(確認せよ) □

補題 3.4 （原点での微分係数）
原点での連続性を仮定すると，推移確率に対して原点での微分係数（∞ も含めて）が存在する．すなわち，

$$q_i = \lim_{h\downarrow 0} \frac{1-p_{ii}(h)}{h} \in [0,\infty],\ i \in S, \quad q_{ij} = \lim_{h\downarrow 0} \frac{p_{ij}(h)}{h} \in [0,\infty),\ i,j \in S,\ j \neq i. \tag{3.2}$$

（証明） まず，$\lim_{h\downarrow 0} \frac{1-p_{ii}(h)}{h}$ の存在について示す．チャップマン・コルモゴロフの等式より，$\boldsymbol{P}(t) = \left[\boldsymbol{P}(\frac{t}{n})\right]^n$．これより，$p_{ii}(t) \geq \left[p_{ii}(\frac{t}{n})\right]^n$ が得られる．原点での連続性と $p_{ii}(0) = 1$ より，n を十分大きく取れば $p_{ii}(\frac{t}{n}) > 0$ となるので，$\forall t \geq 0,\ p_{ii}(t) > 0$ が得られる．そこで，$f_i(t) = -\log p_{ii}(t)$ とおくと，$f_i(t)$ は非負実数値関数で，$\lim_{h\downarrow 0} f_i(h) = 0$ を満たす．さらに，チャップマン・コルモゴロフの等式より $p_{ii}(t+s) \geq p_{ii}(t)\,p_{ii}(s)$ なので，$f_i(t+s) \leq f_i(t) + f_i(s)$ となり，f_i は劣加法性を満たす．よって，$q_i = \sup_{t>0} f_i(t)/t$ と定義すると，$\lim_{h\downarrow 0} f_i(h)/h = q_i$ となる．これより，次が得られる

$$\lim_{h\downarrow 0} \frac{1-p_{ii}(h)}{h} = \lim_{h\downarrow 0} \frac{1-\exp(-f_i(h))}{f_i(h)} \frac{f_i(h)}{h} = q_i \tag{3.3}$$

次に $\lim_{h\downarrow 0} \frac{p_{ij}(h)}{h}$ の存在と有限性について示す．原点での連続性より，任意の $c \in (\frac{1}{2}, 1)$ に対して，ある $\delta > 0$ が存在し，任意の $t \in [0,\delta]$ に対して $p_{ii}(t) > c$ かつ $p_{jj}(t) > c$ とできる．そこで，$nh < \delta$ となるような n, h について，推移確率行列を $\boldsymbol{P}(h)$ とする DTMC $\{X_n\} = \{X(nh)\}$ を考え，これを用いて $p_{ij}(nh)$ を評価する．まず，状態 i から j へのパスを考えることで，

$$p_{ij}(nh) \geq \sum_{r=0}^{n-1} P(X_r = i,\, X_k \neq j,\, 1 \leq k \leq r-1 \,|\, X_0 = i) p_{ij}(h) P(X_n = j \,|\, X_{r+1} = j)$$

を得る．ここで，仮定より，$P(X_n = j \,|\, X_{r+1} = j) = p_{jj}((n-r-1)h) > c$ である．さらに，仮定より，

$$\begin{aligned}
&P(X_r = i,\, X_k \neq j,\, 1 \leq k \leq r-1 \,|\, X_0 = i) \\
&\geq P(X_r = i \,|\, X_0 = i) - P(X_{r-1} = j \,|\, X_0 = i) P(X_r = i \,|\, X_{r-1} = j) \geq c - (1-c) = 2c-1
\end{aligned}$$

を得る．以上より，

$$\frac{p_{ij}(h)}{h} \leq \frac{1}{c(2c-1)} \frac{p_{ij}(nh)}{nh}$$

を得る．ここで，$t < \delta$ を固定し，$h < \delta$ に対して $n = \lfloor \frac{t}{h} \rfloor$ として，

$$\limsup_{h\downarrow 0} \frac{p_{ij}(h)}{h} \leq \frac{1}{c(2c-1)} \limsup_{h\downarrow 0} \frac{p_{ij}(nh)}{nh} = \frac{1}{c(2c-1)} \frac{p_{ij}(t)}{t} < \infty$$

を得る．これにより，$\lim_{h\downarrow 0} \frac{p_{ij}(h)}{h}$ が存在すれば有限であることが分かる．さらに，t に関して両辺の $\liminf_{t\downarrow 0}$ を取り，c をいくらでも 1 に近く設定できることから次を得る．

$$\limsup_{h\downarrow 0} \frac{p_{ij}(h)}{h} \leq \liminf_{t\downarrow 0} \frac{p_{ij}(t)}{t}$$ □

- この定理では，$q_i = \infty$ となる場合も含むことに注意．また，$q_i = \sum_{j\in S,\, j\neq i} q_{ij}$ であることも保証されていない．(後述)

定義 3.6 （微分係数による状態の分類） $q_i = 0$ の時，状態 i は**吸収的 (absorbing)**，$q_i = \infty$ の時，状態 i は**瞬間的 (instantaneous)**，$0 < q_i < \infty$ の時，状態 i は**安定的 (stable)** であるという．

定義 3.7 （推移速度行列） $q_{ii} = -q_i,\ i \in S$ として，$\boldsymbol{Q} = (q_{ij}) = \lim_{h\downarrow 0} \dfrac{\boldsymbol{P}(h) - I}{h}$ を**推移速度行列 (transition rate matrix)** または**無限小生成作用素 (infinitesimal generator)** という．

- ポアソン過程と一様マルコフ連鎖の推移速度行列を求めよ．

3.2.2 安定性，保存性，一様化

ここでは，$\boldsymbol{P}(t)$ の満たす微分方程式が存在する条件を与える．やはり，ポアソン過程や一様マルコフ連鎖については推移確率が陽に与えられているので，容易にその微分方程式を与えることができる．しかし，一般には次の条件が必要となる．

定義 3.8 （安定性と保存性） $\forall i \in S,\ q_i < \infty$ ならば $\boldsymbol{Q}$ は**安定的 (stable)**，$\forall i \in S,\ q_i = \sum_{j\in S,\, j\neq i} q_{ij}$ ならば $\boldsymbol{Q}$ は**保存的 (conservative)** であるという．

- ポアソン過程，一様マルコフ連鎖は安定的で保存的である．(確認せよ)
- $\sum_{j\in S} p_{ij}(h) = 1$ より，$q_i = \lim_{h\downarrow 0} \dfrac{1-p_{ii}(h)}{h} = \lim_{h\downarrow 0} \sum_{j\in S,\, j\neq i} \dfrac{p_{ij}(h)}{h}$ が得られるが，極限と無限和の交換が必ずしも可能でないため，保存性が成り立つとは限らない．ただし，$q_i \geq \sum_{j\in S,\, j\neq i} q_{ij}$ は常に成り立つ．(確認せよ)
- 有限マルコフ連鎖は保存的であり，よって安定的である．(確認せよ)
- 安定性と保存性を仮定すれば，次が成り立つ．
$$\begin{aligned} &P(X(t+h)=i \,|\, X(t)=i) = 1 - q_i h + o(h) \\ &P(X(t+h)=j \,|\, X(t)=i) = q_{ij} h + o(h) \end{aligned} \tag{3.4}$$
- 安定的で保存的であれば，推移速度行列の要素は全て有限で，対角成分は非正，その他の成分は非負であり，$\boldsymbol{Qe} = \boldsymbol{0}$ を満たす．逆に，この条件をみたす行列が与えられた時に，その行列を推移速度行列とする CTMC が構成できるのか，その構成は一意なのかが問題となる．

定義 3.9 （一様化可能条件） 次の条件を一様化可能 (uniformizable) 条件という．
$$\sup_{i\in S} |q_{ii}| < \infty \tag{3.5}$$

補題 3.5 （一様化）
$\boldsymbol{Q} = (q_{ij})$ を *CTMC* $\{X^{(1)}(t)\}$ の推移速度行列とし，保存的で一様化可能条件を満たすものとする．λ を $\sup_{i\in S}|q_{ii}| \leq \lambda < \infty$ を満たす定数とし，強度 λ のポアソン過程を $N(t)$，$\boldsymbol{K} = I + \frac{1}{\lambda}\boldsymbol{Q}$ を推移確率行列とする *DTMC* を $\{\hat{X}_n\}$ とする．この時，一様マルコフ連鎖 $\{X^{(2)}(t)\} = \{\hat{X}_{N(t)}\}$ は $\{X^{(1)}(t)\}$ と同じ推移速度行列を持つ．(このような操作を**一様化 (uniformization)** という．)

(証明) 一様マルコフ連鎖の構成法から明らか．(確認せよ) □

- 有限マルコフ連鎖は常に一様化可能である．
- λ の設定に自由度があるため，一様化は一意ではない．

ここで，もうひとつ CTMC の基本的なモデルをあげておく．

定義 3.10 （出生死滅過程） 状態空間を $\mathcal{N}_+$ とする CTMC で，次のような安定的で保存的な推移速度行列 $\boldsymbol{Q} = (q_{ij})$ を持つものを**出生死滅過程 (birth-and-death process)** という．
$$q_{ij} = \begin{cases} \mu_i & \text{if } i \geq 1,\ j = i-1 \\ \lambda_i & \text{if } i \geq 0,\ j = i+1 \\ -\lambda_i & \text{if } i = j = 0 \\ -(\lambda_i + \mu_i) & \text{if } i \geq 1,\ j = i \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{3.6}$$
ここで，$0 \leq \lambda_i < \infty$ は出生パラメータ，$0 \leq \mu_i < \infty$ は死滅パラメータである．(これと若干異なる条件を設定する定義もある．) また，$\forall i \geq 1,\ \mu_i = 0$ のモデルを純出生過程ともいう．

- $M/M/1$ を初めとして，多くの基本的な待ち行列モデルが出生死滅過程で表現される．
- 残念ながら，出生死滅過程は必ずしも一様化可能ではない．例えば，$M/M/\infty$．

3.2.3 コルモゴロフの微分方程式

ここでは，

$$\frac{\boldsymbol{P}(t+h)-\boldsymbol{P}(t)}{h}=\frac{\boldsymbol{P}(h)-I}{h}\boldsymbol{P}(t)=\boldsymbol{P}(t)\frac{\boldsymbol{P}(h)-I}{h}$$

の極限を考えることで，推移確率行列 $\boldsymbol{P}(t)$ が満たす微分方程式を求める．

定理 3.2 （コルモゴロフの後向き微分方程式）

$\boldsymbol{P}$ が原点で連続であり，$\boldsymbol{Q}$ が安定的で保存的であれば次が成り立つ．

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{P}(t)=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}(t) \tag{3.7}$$

（証明） チャップマン・コルモゴロフの等式より次が得られる．

$$\frac{p_{ij}(t+h)-p_{ij}(t)}{h}=\frac{p_{ii}(h)-1}{h}p_{ij}(t)+\sum_{k\in S,\,k\neq i}\frac{p_{ik}(h)}{h}p_{kj}(t) \tag{3.8}$$

まず，右辺の第 2 項の極限を求める．有限和とすることで次の不等式が得られる．

$$\sum_{k\in S,\,k\neq i}\frac{p_{ik}(h)}{h}p_{kj}(t)\geq\sum_{k=0,\,k\neq i}^{N}\frac{p_{ik}(h)}{h}p_{kj}(t)$$

この不等式の両辺の $\liminf_{h\downarrow 0}$ をとり，$N\to\infty$ とすることで次が得られる．

$$\liminf_{h\downarrow 0}\sum_{k\in S,\,k\neq i}\frac{p_{ik}(h)}{h}p_{kj}(t)\geq\sum_{k\in S,\,k\neq i}q_{ik}p_{kj}(t)$$

次に逆方向の不等式を求める．$N>i$ に対して次が成り立つ．

$$\begin{aligned}\sum_{k\in S,\,k\neq i}\frac{p_{ik}(h)}{h}p_{kj}(t) &\leq \sum_{k=0,\,k\neq i}^{N}\frac{p_{ik}(h)}{h}p_{kj}(t)+\sum_{k>N}\frac{p_{ik}(h)}{h}\\ &=\sum_{k=0,\,k\neq i}^{N}\frac{p_{ik}(h)}{h}p_{kj}(t)+\frac{1-p_{ii}(h)}{h}-\sum_{k=0,\,k\neq i}^{N}\frac{p_{ik}(h)}{h}\end{aligned}$$

この不等式の両辺の $\limsup_{h\downarrow 0}$ をとり，$N\to\infty$ とし，安定性と保存性を考慮することで次が得られる．

$$\limsup_{h\downarrow 0}\sum_{k\in S,\,k\neq i}\frac{p_{ik}(h)}{h}p_{kj}(t)\leq\sum_{k\in S,\,k\neq i}q_{ik}p_{kj}(t)+q_i-\sum_{k\in S,\,k\neq i}q_{ik}=\sum_{k\in S,\,k\neq i}q_{ik}p_{kj}(t)$$

結果として，次が得られる．

$$\lim_{h\downarrow 0}\sum_{k\in S,\,k\neq i}\frac{p_{ik}(h)}{h}p_{kj}(t)=\sum_{k\in S,\,k\neq i}q_{ik}p_{kj}(t)$$

以上を考慮し，式 (3.8) について $h\downarrow 0$ という極限を取ることで次を得る．

$$\lim_{h\downarrow 0}\frac{p_{ij}(t+h)-p_{ij}(t)}{h}=-q_ip_{ij}(t)+\sum_{k\in S,\,k\neq i}q_{ik}p_{kj}(t) \tag{3.9}$$

$p_{ij}(t)$ が連続であり，$\sum_{k\in S,\,k\neq i}q_{ik}=q_i<\infty$ なのでこの右微分も連続である（有界収束定理を用いる）．よって，連続右微分可能な連続関数なので $p_{ij}(t)$ は微分可能で，その導関数は式 (3.9) の右辺で与えられる． □

定理 3.3 （コルモゴロフの前向き微分方程式）

$\boldsymbol{P}$ が原点で連続であり，$\boldsymbol{Q}$ が安定的で（保存的で）あり，

$$\forall i\in S,\ \forall t\geq 0,\ \sum_{k\in S}p_{ik}(t)q_k<\infty \tag{3.10}$$

であれば次が成り立つ．

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{P}(t)=\boldsymbol{P}(t)\boldsymbol{Q} \tag{3.11}$$

（証明） チャップマン・コルモゴロフの等式より次が得られる．

$$\frac{p_{ij}(t+h)-p_{ij}(t)}{h}=\sum_{k\in S}p_{ik}(t)\frac{p_{kj}(h)-\delta_{kj}}{h} \tag{3.12}$$

ところで，式 (3.3) を参考にして次が得られる．

$$\frac{1-p_{ii}(h)}{h}=\frac{1-\exp(-f_i(h))}{f_i(h)}\frac{f_i(h)}{h}\leq\frac{f_i(h)}{h}\leq\sup_{t>0}\frac{f_i(t)}{t}=q_i$$

これより，

$$\frac{p_{kj}(h)}{h} \le \frac{1-p_{kk}(h)}{h} \le q_k$$

が得られ，安定的であることよりこの値は有限となる．よって，式 (3.10) が成り立てば，有界収束定理より，式 (3.12) の右辺は $\lim_{h\downarrow 0}$ の時，$\sum_{k\in S} p_{ik}(t)q_{kj}$ に収束する．後向き微分方程式の証明と同様にして，$p_{ij}(t)$ が微分可能であることが得られる． □

- 一様化条件はコルモゴロフの前向き微分方程式が存在する条件の式 (3.10) の十分条件となっている．また，式 (3.10) の左辺が有限和であり，推移速度行列が安定的であれば，式 (3.10) は常に成り立つ．よって，ポアソン過程，有限マルコフ連鎖，一様マルコフ連鎖はコルモゴロフの前向き後ろ向き両方の微分方程式を常に満たす．

後に定常分布の議論で用いるために，状態分布 $\boldsymbol{a}(t) = (a_i(t))$ に関する微分方程式を求めておく．この微分方程式が成り立には，コルモゴロフの前向き微分方程式と同様な条件が必要となる．

定理 3.4 （大域平衡を表す微分方程式）
$\boldsymbol{P}(t)$ が原点で連続であり，$\boldsymbol{Q}$ が安定的で（保存的で）あり，

$$\forall t \ge 0,\ \sum_{i\in S} a_i(t)q_i < \infty \tag{3.13}$$

であれば次が成り立つ．

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{a}(t) = \boldsymbol{a}(t)\boldsymbol{Q} \tag{3.14}$$

（証明） コルモゴロフの前向き微分方程式と同様に証明される．（確認せよ） □

- この微分方程式を要素で書くと，
$$\frac{d}{dt}a_i(t) = \sum_{j\in S,\, j\ne i} a_j(t)q_{ji} - a_i(t)q_i \tag{3.15}$$
となる．よって，この微分方程式は，状態 i である確率 $a_i(t)$ の変化率が，“状態 i に入る率 − 状態 i から出る率” となっていることを示してる．

3.2.4 推移速度行列を用いた推移確率行列の表現

有限マルコフ連鎖について，コルモゴロフの微分方程式の解を与えておく．

補題 3.6 有限マルコフ連鎖では，初期値を $\boldsymbol{P}(0) = I$ として，コルモゴロフの微分方程式を満たす唯一の解は次で与えられる．

$$\boldsymbol{P}(t) = \exp(t\boldsymbol{Q}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t\boldsymbol{Q})^n}{n!} \tag{3.16}$$

（証明） 常微分方程式の初期値問題に帰着させて考えればよい． □

- 状態数が可算の場合に，式 (3.16) の右辺が収束するという保証はない．ただし，一様化可能条件を満たす場合は式 (3.16) で推移確率行列を与えることができる．（確認せよ）

3.3 隠れマルコフ連鎖による表現

状態空間 S 上の CTMC を $\{X(t)\}_{t\ge 0}$ とし，その推移確率行列を $\boldsymbol{P}(t)$ とする．前小節では，推移速度行列を通して CTMC の特徴付けを行なった．ここでは，サンプルパスがどのように構成されているかという視点からの特徴付けを行なう．すなわち，τ_n を n 番目の状態推移時点，$X_n = X(\tau_n),\ n \ge 0,$ とすると，$\{X_n\}$ は DTMC となり（隠れマルコフ連鎖），推移時点間隔 $\tau_{n+1} - \tau_n$ は X_n にのみ依存した指数分布に従うことを示す．

3.3.1 正の滞在時間と正則性

扱い易いモデルとするため，次の仮定をおく．

仮定 3.1 （正の滞在時間） 滞在時間（各状態に留まる時間）は確率 1 で正である．

仮定 3.2 （正則性 (regularity)） 任意の $s \geq 0$ に対して，$\{X(t)\}_{t\geq 0}$ の $[0, s]$ における不連続点は確率 1 で有限個である．

- 正の滞在時間を仮定することで，状態変化のあった時点を順に $\tau_0 = 0 < \tau_1 < \tau_2 < \ldots$ とすることができる．（正則性を仮定しないと，この時点列が状態変化のあった時点を全て含むという保証はない．）ただし，時間区間 $(0, \infty)$ に有限個 $(= n < \infty)$ の状態推移時点しかなかった場合は，便宜上 $\forall k \geq 1$, $\tau_{n+k} = \infty$ とおく．
- $\tau_\infty = \lim_{n\to\infty} \tau_n$ とおく．正則性より，$\tau_\infty = \infty$ となる．

時点 τ_n で状態変化前の値を取るのか後の値を取るのかの自由度があるため，さらに次の仮定をおく．

仮定 3.3 時点 τ_n で状態 i から j へ変化したならば，$X(\tau_n) = j$ とする．

- 正の滞在時間と正則性より，$\{X(t)\}$ のサンプリパスは右連続となり，見なれたサンプルパスの図になる．（正則性を仮定しないと，必ずしも右連続とはならない．）
- ポアソン過程，有限マルコフ連鎖，一様マルコフ連鎖は正の滞在時間を持ち，正則である．（確認せよ）
- 出生死滅過程につては正則性を満たす保証はない．（$\lambda_n = 2^n$ の純出生過程を考えよ．）

3.3.2 強マルコフ性

DTMC と同様，CTMC についても，時点を停止時間に置き換えてもマルコフ性が成り立つ．ここでは，正の滞在時間と正則性を仮定した場合を定理として与えておく．もっと弱い条件の場合については文献 [1] を参照．状態推移時点 τ_n は停止時間となるので，強マルコフ性を用いて隠れマルコフ連鎖による表現が得られることになる．

定義 3.11 （停止時間） $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ を S 上の連続時間確率過程とする．時点を値とする確率変数 τ（$\tau = \infty$ の場合を含める）で，$\tau = t$ であるかどうかが $\{X(s), s \in [0, t]\}$ によって決る（すなわち，$1_{\{\tau=t\}}$ が $\{X(s), s \in [0, t]\}$ の関数として与えられる）ものを $\{X(t)\}$ の**停止時間 (stopping time)** という．

- 状態推移時点 τ_n は停止時間である．（確認せよ）

定理 3.5 （強マルコフ性 (strong Markov property) ）
状態空間を S とする *CTMC* を $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ とし，$\boldsymbol{P}(t)$ をその推移確率行列とする．$\{X(t)\}$ は正の滞在時間を持ち，正則であるとする．この時，τ を $\{X(t)\}$ の停止時間とすると，次の性質が成り立つ．

(i) $X(\tau) = k$ という条件の下，τ より前の過程と τ より後の過程は独立である．

(ii) $X(\tau) = k$ という条件の下，τ より後の過程は正の滞在時間を持ち，正則な *CTMC* となり，その推移確率行列は $\boldsymbol{P}(t)$ で与えられる．

（証明） 文献 [2] を参照． □

3.3.3 隠れマルコフ連鎖と指数滞在時間

以上の準備の下，次の定理が得られる．

定理 3.6 （隠れマルコフ連鎖と指数滞在時間）
状態空間を S とする *CTMC* を $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ とし，$\boldsymbol{P}(t)$ をその推移確率行列とする．$\{X(t)\}$ は正の滞在時間を持ち，正則であるとする．$\{\tau_n\}_{n\geq 0}$ を $\{X(t)\}$ の状態推移時点列とし，離散時間確率過程 $\{X_n\}_{n\geq 0}$ を $X_n = X(\tau_n)$, $n \geq 0$ で定義する．この時，$\{X_n\}$ は状態空間 S 上の *DTMC* となり，推移時点間隔 $\tau_{n+1} - \tau_n$ は X_n にのみに依存した指数分布に従う．すなわち，$\boldsymbol{P} = (p_{ij})$, $p_{ij} = P(X_1 = j \,|\, X_0 = i)$ とすると，各 $i \in S$ に対して $0 \leq \lambda_i < \infty$ が存在し，次が成り立つ．

$$P(X_{n+1} = j,\, \tau_{n+1} - \tau_n > t \,|\, X_0, \ldots, X_{n-1}, X_n = i, \tau_1 - \tau_0, \ldots, \tau_n - \tau_{n-1}) = p_{ij}\, e^{-\lambda_i t} \tag{3.17}$$

（証明） まず，滞在時間が指数分布であることを示す．

$$f_i(t) = P(\tau_1 > t \,|\, X(0) = i) = P(X(u) = i,\, 0 \leq u \leq t \,|\, X(0) = i)$$

と置くと，マルコフ性と斉時性より

$$\begin{aligned} f_i(t+s) &= P(X(u)=i,\, 0 \le u \le t+s \,|\, X(0)=i) \\ &= P(X(u)=i,\, s \le u \le t+s \,|\, X(s)=i)\, P(X(u)=i,\, 0 \le u \le s \,|\, X(0)=i) = f_i(t)f_i(s) \end{aligned}$$

となる．正の滞在時間の仮定より，$\lim_{h\downarrow 0} f_i(h) = f_i(0) = P(\tau_1 > 0 \,|\, X(0)=i) = 1$ である．よって，$f_i(t)$ は連続であり，単調非増加であることから，ある $0 \le \lambda_i < \infty$ が存在して，$f_i(t) = e^{-\lambda_i t}$ となる．

次に式 (3.17) を導く．式 (3.17) の右辺の条件付確率の条件は，τ_n 以前における CTMC の挙動を表しているので，$\{X(s),\, s<\tau_n,\, X(\tau_n)=i\}$ と同値である．よって，強マルコフ性と斉時性より，

$$\begin{aligned} \text{式 (3.17) の左辺} &= P(X_{n+1}=j,\, \tau_{n+1}-\tau_n > t \,|\, X(s),\, s<\tau_n,\, X(\tau_n)=i) \\ &= P(X_{n+1}=j,\, \tau_{n+1}-\tau_n > t \,|\, X(\tau_n)=i) \\ &= P(X_1=j,\, \tau_1 > t \,|\, X(0)=i) \\ &= P(\tau_1 > t \,|\, X(0)=i)P(X_1=j \,|\, \tau_1>t,\, X(0)=i) = e^{-\lambda_i t} P(X_1=j \,|\, \tau_1>t,\, X(0)=i) \end{aligned}$$

が得られる．さらに，マルコフ性より次が得られる．

$$\begin{aligned} P(X_1=j \,|\, \tau_1>t,\, X(0)=i) &= P(\{X(t+s)\}_{s\ge 0}\ \text{は初めの推移で状態}\ j\ \text{へ移る} \,|\, X(s)=i,\, s\in[0,t]) \\ &= P(\{X(t+s)\}_{s\ge 0}\ \text{は初めの推移で状態}\ j\ \text{へ移る} \,|\, X(t)=i) \\ &= P(\{X(s)\}_{s\ge 0}\ \text{は初めの推移で状態}\ j\ \text{へ移る} \,|\, X(0)=i) \\ &= P(X(\tau_1)=j \,|\, X(0)=i) = p_{ij} \end{aligned}$$

□

定義 3.12 （隠れマルコフ連鎖） 定理 3.6 で定義された DTMC を**隠れマルコフ連鎖 (embedded Markov chain: EMC)** という．その構成から明らかなように，EMC の推移確率行列 $\boldsymbol{P}=(p_{ij})$ の対角成分はゼロ ($\forall i \in S,\, p_{ii}=0$) である．

- 定理 3.6 は，EMC と指数時間により CTMC が構成できることを示している．すなわち，時点 t で状態 i にあったとすると，その状態 i にはパラメータ λ_i の指数時間だけ留まり，その後，EMC の推移確率に従って他の状態に推移する．以後，これを繰り返すことで状態が変化していく確率過程として CTMC が構成される．
- 吸収状態がある場合，定理 3.6 の EMC は若干修正する必要がある．すなわち，吸収状態に吸収された後の状態として新たに Δ を付け加えた状態空間 $S \cup \{\Delta\}$ を考え，$p_{\Delta,\Delta}=1$ とし，$q_i=0$ であるような状態 i（吸収状態）に対しては $p_{i\Delta}=1$，その他の状態 $(q_i>0)$ に対しては $p_{i\Delta}=0$ とする．これは，EMC の構成の仕方から，i が吸収状態であっても $p_{ii}=0$ となってしまうためである．
- 時点 t までの状態推移の回数を $N(t)=\sup\{n\,;\,\tau_n \le t\}$ とする．正則性の仮定より，$\lim_{t\to\infty} N(t)=\infty$ であり，この $N(t)$ を用いて $X(t)=X_{N(t)}$ と表すことができる．この関係は，CTMC の性質を EMC の性質から導く場合に有効となる（例えば，後に示す到達可能性や再帰性など）．

次に，定理 3.6 の中で与えた $\boldsymbol{P}=(p_{ij}),\, \lambda_i,\, i\in S$ と推移速度行列 $\boldsymbol{Q}=(q_{ij})$ との関係を証明なしで示す（証明は文献 [2] を参照）．まず，推移速度行列の性質に関する補題を与える．

補題 3.7 正の滞在時間を持ち，正則な *CTMC* の推移確率行列は原点で連続であり，その推移速度行列は安定的で保存的である．

定理 3.7 （隠れマルコフ連鎖と推移速度行列の関係）
定理 *3.6* の仮定の下，*CTMC* $\{X_t\}_{t\ge 0}$ の推移速度行列を $\boldsymbol{Q}=(q_{ij})$ とるす．この時，次が成り立つ．

$$\lambda_i = q_i,\ i\in S, \quad p_{ij} = \frac{q_{ij}}{q_i},\ i,j\in S \tag{3.18}$$

ただし，$q_i=0$ の時は $p_{ij}=0$ とする．

例 3.1 （ポアソン過程とポアソン到着）

待ち行列モデルではポアソン過程に従った客の到着をポアソン到着ともいう．客が強度 λ のポアソン過程に従って到着しているものとし，$N(t)$ を区間 $(0,t]$ に到着した客数とする．ポアソン過程には例 3.2 の定義の他に幾つかの同値な定義があり,「到着間隔が i.i.d. で指数分布に従う計数過程」というのもそのひとつである．この定義より，

$\{N(t)\}$ を，次に到着が発生するまで状態 i にパラメータ λ の指数時間だけ留まり，その後，推移確率 $p_{i,i+1} = 1$ で状態 $i+1$ に推移する CTMC と捉えることができる．

例 3.2　（ポアソン到着，指数時間サービスの待ち行列モデル; $M/M/1$ モデル）

客が到着率 λ でポアソン到着し，到着した客は順番に，サービス時間がパラメータ μ の指数分布に従うサービスを受けて退去する待ち行列モデルを考える．この時，$L(t)$ を時点 t でシステム内にいる客数とすると，確率過程 $\{L(t)\}$ は状態空間を $S = \{0, 1, ...\}$ とする CTMC となる．なぜならば，状態 $i > 0$ には次に到着が発生するかまたはサービスが終了するまでの時間とどまるが，この時間はパラメータ $\lambda + \mu$ の指数時間となる[10]．その状態推移が到着の発生であれば推移確率 $p_{i,i+1} = \frac{\lambda}{\lambda+\mu}$ で状態 $i+1$ に推移し，サービスの終了であれば推移確率 $p_{i,i-1} = \frac{\mu}{\lambda+\mu}$ で状態 $i-1$ に推移する．指数分布の無記憶性から，この状態推移後も同様の過程を繰り返す．また，推移速度行列は次で与えられることが分かる．

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} -\lambda & \lambda & 0 & 0 & \cdots \\ \mu & -(\lambda+\mu) & \lambda & 0 & \cdots \\ 0 & \mu & -(\lambda+\mu) & \lambda & \ddots \\ 0 & 0 & \mu & -(\lambda+\mu) & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

3.4　定常分布と再帰性

定常分布と長時間経過後の挙動については，離散時間マルコフ連鎖についての議論と連続時間マルコフ連鎖についてのそれが並列的に進む．

3.4.1　関連する諸概念

定義 3.13 （定常分布） 推移確率行列を $\{\boldsymbol{P}(t)\}_{t\geq 0}$ とし，任意の $t \geq 0$ に対して $\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{P}(t) = \boldsymbol{\pi}$ を満たす確率ベクトル $\boldsymbol{\pi}$ が存在する時，$\boldsymbol{\pi}$ を $\{\boldsymbol{P}(t)\}$，または，それに対応する CTMC の**定常分布 (stationary distribution)** という．

- DTMC と同様，定常分布を初期分布とする CTMC は定常過程となる.（確認せよ）
- $\boldsymbol{P}(t)$ が原点で連続で，定常分布 $\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)$ を持ち，推移速度行列 $\boldsymbol{Q} = (q_{ij})$ が安定的で保存的であるとする．この時，大域平衡を表す微分方程式（定理 3.4）より，$\sum_{i\in S} \pi_i q_i < \infty$ ならば，定常分布 $\boldsymbol{\pi}$ は平衡方程式 $\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{0}^\top$ を満たす．この逆は必ずしも成り立たない．定常分布であることと平衡方程式を満たすことが必要十分条件となる条件については後で定理として示す．
- 有限マルコフ連鎖では，平衡方程式を満たす確率ベクトルは定常分布である.（確認せよ）
- ポアソン過程のパラメータを λ，DTMC の推移確率行列を $\boldsymbol{K}$ とする一様マルコフ連鎖では，平衡方程式を満たす確率ベクトルは定常分布である．さらに，一様マルコフ連鎖に定常分布が存在すれば，それは一様マルコフ連鎖を構成する DTMC の定常分布と一致する.（確認せよ）

定義 3.14 （到達可能，相互到達可能，既約） $\exists t \geq 0$ s.t. $p_{ij}(t) > 0$ ならば j は i から**到達可能 (reachable)** であるという．これを $i \to j$ と記述する．さらに，$i \to j$ かつ $j \to i$ ならば i と j は**相互到達可能 (mutually reachable or communicate)** であるという．これを $i \leftrightarrow j$ と記述する．全ての状態が相互到達可能な CTMC を**既約なマルコフ連鎖 (irreducible Markov chain)** という．

- 正の滞在時間と，正則性を仮定すると，CTMC の既約性とその隠れマルコフ連鎖の既約性は同値となる．
- $q_i = 0$ ならば状態 i は吸収状態となる．よって，既約であれば $\forall i \in S,\ q_i > 0$ である．
- 周期性という概念は CTMC にはない.（EMC が周期的な場合はある.）

定義 3.15 （再帰時間） 状態 i での滞在時間を $T_i = \inf\{t \geq 0 \,|\, X(t) \neq i\}$ （$\forall t \geq 0,\ X(t) = i$ ならば $T_i = \infty$）とし，状態 i の**再帰時間 (return time)** を $R_i = \inf\{t \geq 0 \,|\, t > T_i,\ X(t) = i\}$ （$T_i = \infty$ または $\forall t \geq T_i,\ X(t) \neq i$ ならば $R_i = \infty$）とする．

[10] T，H をそれぞれパラメータ λ，μ の独立な指数時間とすると，$\min\{T, H\}$ はパラメータ $\lambda + \mu$ の指数時間となる．また，この時，$\min\{T, H\} = T$ となる確率は $\frac{\lambda}{\lambda+\mu}$，$\min\{T, H\} = H$ となる確率は $\frac{\mu}{\lambda+\mu}$ で与えられる．

- T_i, R_i は停止時間である.（確認せよ）

定義 3.16 （一時的，正再帰的，零再帰的） $P(R_i < \infty \mid X(0) = i) = 1$ の時，状態 i は**再帰的 (recurrent)**，$P(R_i < \infty \mid X(0) = i) < 1$ の時，状態 i は**一時的 (transient)** という．再帰的な状態 i について，$\mathrm{E}[R_i \mid X(0) = i] < \infty$ ならば**正再帰的 (positive recurrent)**，$\mathrm{E}[R_i \mid X(0) = i] = \infty$ ならば**零再帰的 (null recurrent)** という.

- 以下では，平均再帰時間を $\mu_{ii} = \mathrm{E}[R_i \mid X(0) = i]$ と記す.
- 状態 i が再帰的であれば $q_i > 0$ となる.
- 正の滞在時間と正則性を仮定すると，状態 i が再帰的（一時的）であることと，その EMC において状態 i が再帰的（一時的）であることは同値となる.（確認せよ）
- しかし，正の滞在時間と，正則性を仮定しても，状態 i が正再帰的（零再帰的）であることと，その隠れマルコフ連鎖において状態 i が正再帰的（零再帰的）であることは必ずしも同値とはならない.（後述）

3.4.2 不変測度

定義 3.17 （不変測度） 非ゼロベクトル $\boldsymbol{\nu} = (\nu_i)$ $(\boldsymbol{\nu} \neq \mathbf{0})$ が任意の $t \geq 0$ に対して $\boldsymbol{\nu}\boldsymbol{P}(t) = \boldsymbol{\nu}$ を満たす時，$\boldsymbol{\nu}$ を $\{\boldsymbol{P}(t)\}$ の**不変測度 (invariant measure)** という.

補題 3.8 （不変測度の表現）
正の滞在時間を持ち，正則であり，既約で再帰的な *CTMC* $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ の推移速度行列を $\boldsymbol{Q}$ とする．この時，不変速度 $\boldsymbol{\nu} > \mathbf{0}$ が存在して，定数倍を除いて一意であり，以下のようにして与えられる.

(i) 再帰時間内における滞在時間の期待値として（状態 0 は他のどの状態に置き換えてもよい）：

$$\nu_i = E\left[\int_0^{R_0} 1_{\{X(s)=i\}} ds \,\middle|\, X(0) = 0\right],\ i \in S. \tag{3.19}$$

(ii) *EMC* の不変測度 $\boldsymbol{x}$ を用いて（T_0 は *EMC* における状態 0 の初到達時間）：

$$\nu_i = \frac{x_i}{q_i} = \frac{E\left[\sum_{n=1}^{T_0} 1_{\{X_n=i\}} \,\middle|\, X(0) = 0\right]}{q_i},\ i \in S. \tag{3.20}$$

(iii) 平衡方程式の解として：

$$\boldsymbol{\nu}\boldsymbol{Q} = \mathbf{0}^\top. \tag{3.21}$$

（証明） 文献 [2] を参照. □

- $\sum_{i\in S} \nu_i = \mathrm{E}[R_0 \mid X(0) = 0] = \mu_{00}$ である．次の補題はこれより直ちに得られる.

補題 3.9 （不変測度と再帰性）
正の滞在時間を持ち，正則であり，既約で再帰的な *CTMC* $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ の不変速度を $\boldsymbol{\nu}$ とする．この時,

$$\{X(t)\} \text{ が正再帰的} \Leftrightarrow \sum_{i\in S} \nu_i < \infty.$$

- 式 (3.20) で与えれる CTMC の不変測度 $\boldsymbol{\nu}$ と EMC の不変測度 $\boldsymbol{x}$ の間には，任意の $i \in S$ に対して $q_i\nu_i = x_i$ の関係がある．これより，CTMC と EMC の正再帰性は必ずしも一致しないことが分かる.

3.4.3 正再帰的な CTMC

定理 3.8 （正再帰的であるための必要十分条件） 正の滞在時間を持ち，正則で，既約な *CTMC* $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ について，正再帰的であることと定常分布 $\boldsymbol{\pi}$ が存在することは同値であり，$\boldsymbol{\pi}$ は平衡方程式 $\boldsymbol{\pi}\boldsymbol{Q} = \mathbf{0}^\top$ を満たす確率ベクトルとして与えられる．さらに，定常分布 $\boldsymbol{\pi}$ が存在すれば，それは一意でかつ $\boldsymbol{\pi} > \mathbf{0}$ である.

（証明）（正再帰的 $\Rightarrow$ 定常分布が存在） 補題 3.8, 3.9 より，不変測度を正規化すればよい.

（定常分布が存在 $\Rightarrow$ 正再帰的） $\boldsymbol{\pi}$ を定常分布とする．もし，CTMC が一時的であるとすると，その EMC も一時的となり，$\lim_{t\to\infty} p_{ij}(t) = 0$ となる．よって，有界収束定理から $\lim_{t\to\infty} \boldsymbol{\pi}\boldsymbol{P}(t) = \mathbf{0}^\top$ となるが，これは定常分

布の定義に矛盾．よって，CTMC は再帰的となり，定常分布は和が有限な不変測度なので，補題 3.9 より CTMC は正再帰的となる．

（平衡方程式を満たす確率ベクトルが定常分布であること） $\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)$ を平衡方程式の解とし，次を定義する．

$$p_{ij}^{(n)}(t) = P(X(t) = j,\, t < \tau_n \,|\, X(0) = i)$$

これは，時点 t までの状態変化の回数が n 未満である場合の推移確率である．これを以下のような漸化式で表す．

$$\begin{aligned} &p_{ij}^{(1)}(t) = \delta_{ij} e^{-q_i t} \\ &p_{ij}^{(n)}(t) = \delta_{ij} e^{-q_i t} + \textstyle\int_0^t \sum_{k\in S,\, k\neq j} p_{ik}^{(n-1)}(u) q_{kj} e^{-q_j(t-u)} du,\ n \geq 2 \end{aligned} \tag{3.22}$$

式 (3.22) の第 2 式の右辺第 1 項は，状態変化を起こさずに時点 t で状態 j にいる確率を表している．右辺第 2 項は時点 u で区間 $(0, t]$ における最後の推移（推移の回数は n 未満）が起こって状態 j に移り，そのまま時点 t まで状態 j にいる確率を表している．正則性から

$$\lim_{n\to\infty} p_{ij}^{(n)}(t) = p_{ij}(t), \quad \sum_{j\in S} p_{ij}(t) = 1$$

である．

次に，式 (3.22) の第 2 式の両辺に π_i を掛けて和をとることで次を得る．

$$\sum_{i\in S} \pi_i p_{ij}^{(n)}(t) = \pi_j e^{-q_j t} + \int_0^t e^{-q_j(t-u)} \sum_{k\in S,\, k\neq j} q_{kj} \sum_{i\in S} \pi_i p_{ik}^{(n-1)}(u) du$$

第 1 式からは次を得る．

$$\sum_{i\in S} \pi_j p_{ij}^{(1)}(t) = \pi_j e^{-q_j t} \leq \pi_j$$

よって，$\boldsymbol{\pi}$ が平衡方程式の解であることと帰納法を用いることで次を得る．

$$\sum_{i\in S} \pi_i p_{ij}^{(n)}(t) \leq \pi_j,\, n \geq 1$$

この式より，有界収束定理を用いて次を得る．

$$\sum_{i\in S} \pi_i p_{ij}(t) \leq \pi_j$$

j について和をとると，両辺とも 1 となるのでこの式は等号で成り立たないといけない．よって，$\boldsymbol{\pi}$ は任意の $t \geq 0$ に対して $\boldsymbol{\pi P}(t) = \boldsymbol{\pi}$ を満たすので定常分布である．

（定常分布の一意性と $\boldsymbol{\pi} > \mathbf{0}$ であること） 定常分布が存在すれば再帰的であり，定常分布は不変測度でもあるので補題 3.8 より明らか． □

- この定理の証明における式 (3.22) は，推移確率行列を推移速度行列から構成するひとつの方法を示している．
- この定理より，定常分布は，平衡方程式 $\boldsymbol{xQ} = \mathbf{0}^\top$ と正規化条件 $\boldsymbol{xe} = 1$ を満たす解として求められる．
- 例 3.2 の $M/M/1$ モデルでは，平衡方程式と正規化条件より，$\rho = \frac{\lambda}{\mu} < 1$ として，$\pi_n = (1-\rho)\rho^n$ となる．
- $\pi_i q_{ij}$ を状態 i から j への確率フローとし，その確率フローに関する方程式から定常分布を求める方法がある．これは，状態の部分集合を考え，その部分集合から出る確率フローと入る確率フローが等しくなるという関係から方程式系を構成するものである．このように構成された方程式系は平衡方程式と同値であり，構成の仕方によっては計算が容易になることが分かっている．

補題 3.10 （定常分布と再帰時間）

正の滞在時間を持ち，正則で，既約な *CTMC* $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ について，定常分布が存在すれば次が成り立つ．

$$\pi_i = \frac{1}{q_i\, E[R_i \,|\, X(0) = i]} = \frac{1}{q_i\, \mu_{ii}} \tag{3.23}$$

（証明） 式 (3.19) より，$\nu_0 = \frac{1}{q_0}$, $\sum_{i\in S} \nu_i = \mathrm{E}[R_0 \,|\, X(0) = 0]$ となる．よって，$\pi_0 = 1/(q_0\, \mathrm{E}[R_0 \,|\, X(0) = 0])$ が得られる．状態 0 は任意でよいので補題の結果が得られる． □

- CTMC も EMC も共に正再帰的であれば，CTMC の定常分布 $\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)$ と EMC の定常分布 $\tilde{\boldsymbol{\pi}} = (\tilde{\pi}_i)$ の間に次の関係が成り立つ．

$$\forall i, j \in S,\ \frac{\pi_i q_i}{\pi_j q_j} = \frac{\tilde{\pi}_i}{\tilde{\pi}_j}$$

これより，$\boldsymbol{\pi}$ を $\tilde{\boldsymbol{\pi}}$ で表す，または，$\tilde{\boldsymbol{\pi}}$ を $\boldsymbol{\pi}$ で表す次の式が得られる．

$$\pi_i = \frac{\tilde{\pi}_i/q_i}{\sum_{j\in S}\tilde{\pi}_j/q_j}, \quad \tilde{\pi}_i = \frac{\pi_i q_i}{\sum_{j\in S}\pi_j q_j}$$

3.5 極限分布

定義 3.18 （エルゴード的な CTMC） 正の滞在時間を持ち，正則で，既約な CTMC が正再帰的である場合，**エルゴード的** (ergodic) であるという．

定理 3.9 （エルゴード的な場合の極限分布）
正の滞在時間を持ち，正則であり，既約で正再帰的な状態空間 S 上の *CTMC* を $\{X(t)\}$ とし，その推移確率行列を $\boldsymbol{P}(t) = (p_{ij}(t))$，定常分布を $\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)$ とする．この時，次が成り立つ．

$$\forall i, j \in S, \lim_{t\to\infty} p_{ij}(t) = \pi_j. \tag{3.24}$$

（証明） CTMC を単位時間毎に観測した過程 $\{X(n)\}_{n\geq 0}$ を考える．まず，元の CTMC が既約あることから，$\{X(n)\}$ も既約となる．さらに，$\boldsymbol{\pi}$ が $\{X(n)\}$ の定常分布となることから $\{X(n)\}$ は正再帰的である（定理 2.7）．CTMC において，各状態での滞在時間は指数分布に従うことから，$\{X(n)\}$ は周期的にはなり得ない．

今，共通の推移速度行列として $\boldsymbol{P}(t)$ を持つが，初期分布が異なる独立な二つの CTMC $\{X^{(1)}(t)\}$ と $\{X^{(2)}(t)\}$ を考える．この時，$\{X^{(1)}(n)\}_{n\geq 0}$ と $\{X^{(2)}(n)\}_{n\geq 0}$ は同じ推移確率行列に従う独立で非周期的な DTMC となり，その定常分布は $\boldsymbol{\pi}$ で与えられる．よって，補題 2.17 の証明より，確率 1 で有限な時間 τ が存在し，$X^{(1)}(\tau) = X^{(2)}(\tau)$ となる．これは，元の CTMC $\{X^{(1)}(t)\}$ と $\{X^{(2)}(t)\}$ が少なくとも時点 τ で同じ状態にあることを示している．よって，離散時間マルコフ連鎖の場合（補題 2.17）と同様にして，$\{X^{(2)}(t)\}$ と同じ確率法則に従い，$\{X^{(1)}(t)\}$ とカップリングする CTMC $\{X^{(3)}(t)\}$ が構成できる．後は，カップリング不等式を用いて $\{X^{(1)}(t)\}$ と $\{X^{(3)}(t)\}$ の極限分布が一致することが示される．　□

参考文献

[1] D. P. Heyman and M. J. Sobel, Stochastic Models in Operations Research Vol. I, McGraw-Hill (1982).

[2] P. Brémaud, Markov Chains – Gibbs Fields, Monte Carlo Simulation, and Queues, Springer (1999).