

マルコフ連鎖とそのORへの応用

木島 正明

1. はじめに

マルコフ連鎖が何かということは後にして、まず次の例によりマルコフ連鎖の応用の可能性を見てみよう。

例1 バブル絶頂期には日本のほとんどの金融機関が最高の格付けであったが、バブル崩壊後にそのほとんどで見直しが行われ、格付けが下げられてしまった。このことから行政や経営のあり方を議論することも重要であるが、企業の格付け(信用度)も時間とともに変化するものであるということから、この推移のデータを使って信用力(信用リスク)の定量化を行なおうという考え方で出てきている(詳しくは[9]を参照)。つまり、信用度を状態とし、これが時間とともに変化し(吸収状態である)倒産までの推移をマルコフ連鎖で定式化しようというのである。もちろんデータの吟味や、厳密な意味でのマルコフ性の確認も重要であるが、それ以上にここで注目したいことは、信用リスク管理のために唯一の観測可能なデータである格付けの推移を使おうということである。

例2 人間の健康度もある意味で時間とともに変化しており、人間の場合には推移の変化を見守るだけでなく、病気になるば医者に行くであろうし、医者は病状により適切な治療を施すであろう。ここで「適切な」という意味は、最近の医療コンセプトに立脚すれば、患者の効用と(患者および社会の)経済的な負担を勘案して、患者にとって最適な治療を選ぶということであろう。このためには各治療法の効果のデータを収集し、治療による病状の推移を正確に定量化するだけでなく、患者個人の持つ病状に対する(負の)効用を数量化することが必要となる。もし、これらのことが可能であれば、適当に定義された病状を状態とし、各治療法に依存した推移確率を持

つマルコフ連鎖が定式化され(例えば[27])、しかも(これらのモデルにより)患者の効用および費用に関して最適な治療法を選ぶことができるであろう。

2. マルコフ性とは

マルコフ性の概念は離散時点の方が理解し易いので、本稿では時間の集合を $T = \{0, 1, 2, \dots\}$ とする。連続時点マルコフ連鎖については[2]を参照して頂きたい。以下では \mathcal{N} を離散的な状態空間とし、 $\{X_t, t \in T\}$ を \mathcal{N} 上の確率過程とする。確率過程とは時間のインデックス t を持つ確率変数の列のことで、一般の確率過程では X_{t+1} の従う(条件付き)確率分布は、時点 t までにこの確率過程がどのような値をとってきたかという履歴

$$\mathcal{F}_t = \{X_0 = i_0, \dots, X_{t-1} = i_{t-1}, X_t = i\}$$

に依存すると考えられる。これに対して $\{X_t\}$ がマルコフ性を持つとは、 X_{t+1} の(条件付き)確率分布が X_t の値にしか依存しない、つまり、すべての状態 $i, j \in \mathcal{N}$ とすべての時点 $t \in T$ に対して

$$P[X_{t+1} = j | \mathcal{F}_t] = P[X_{t+1} = j | X_t = i] \quad (1)$$

が成立することである。一方、独立性は X_{t+1} の確率分布が現在や過去に依存しない場合で

$$P[X_{t+1} = j | \mathcal{F}_t] = P[X_{t+1} = j] \quad (2)$$

と表現できる。2つの式(1)と(2)を比べると、マルコフ性と独立性には一見たいした違いがなさそうであるが、実際には大きな違いがある。英語のアルファベットをマルコフ的に発生させた場合と独立に発生させたものとを比較してみると、驚くほどの差が現われる([1]を参照)。また、現実問題への適用という観点から見ると、古典的確率論の重要な結果である中心極限定理などは独立性の仮定が成り立つのであるが、現実の問題ではこの独立性の仮定は少し強すぎる場合が多い。逆に、一

般性を追求しすぎたのでは複雑すぎて目ぼしい結果は何も得られないであろう。そこで、独立性を弱めたマルコフ性を仮定するのである。こうすることで解析的に扱い易く、しかも広い応用範囲を持つ確率過程が得られる。実際、「システムのモデル化に際して状態空間をうまくとれば、たいていのシステムがマルコフ性を持っていると考えられる」と言い切る人もいるほどである。マルコフ性を持つ確率過程はマルコフ過程と呼ばれ Markov (1856-1922) により提案された。本稿ではマルコフ過程のうち状態を表わす集合 \mathcal{N} が非負の整数またはその部分集合である場合、すなわちマルコフ連鎖とその OR における応用の可能性について解説する(より詳しくは [17] を見よ)。なお参考文献はできるだけ最近のものをつ挙げることにし、さらに深く研究してみようという読者はその文献からサーベアーを始めて頂きたい。

3. 有限マルコフ連鎖

マルコフ連鎖 $\{X_t\}$ の確率的挙動は、(1) の右辺

$$p_{ij}(t) = P[X_{t+1} = j | X_t = i], \quad i, j \in \mathcal{N}, \quad t \in T$$

が与えられることにより決定される。この条件付き確率 $p_{ij}(t)$ を時点 t での状態 i から状態 j への 1 ステップ推移確率と呼ぶ。特に、推移確率が時点に依存しない場合、すなわち、すべての $t \in T$ に対して

$$p_{ij} = P[X_{t+1} = j | X_t = i], \quad i, j \in \mathcal{N}$$

となっているとき、マルコフ連鎖 $\{X_t\}$ は斉時的であるという。以下では斉時的な場合のみを考える。

斉時的マルコフ連鎖の 1 ステップ推移確率は、2つの状態の対 (i, j) が決まれば、それに対して1つの確率値 p_{ij} が対応する。このため、斉時的マルコフ連鎖では推移確率をまとめて推移確率行列と呼ばれる行列で表現する。いま状態数を有限とし、状態を適当に番号付けすることで状態空間を $\mathcal{N} = \{0, 1, \dots, N\}$ とする。このとき推移確率行列は

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} & \cdots & p_{0N} \\ p_{10} & p_{11} & \cdots & p_{1N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{N0} & p_{N1} & \cdots & p_{NN} \end{pmatrix}$$

で与えられる。

推移確率行列 \mathbf{P} の構成要素である p_{ij} は確率であるから非負の値をとる。また、マルコフ連鎖がある時点で状態 i にいれば、次の時点では取りうる状態のうちどれかには必ず移るので

$$\sum_{j=0}^N p_{ij} = 1; \quad p_{ij} \geq 0, \quad i, j \in \mathcal{N}$$

とならなければならない。この条件を行列形式で書けば¹

$$\mathbf{P}\mathbf{1} = \mathbf{1}; \quad \mathbf{P} \geq \mathbf{0} \quad (3)$$

となる ($\mathbf{1}$ は要素がすべて 1 のベクトル) が、このような行列を確率行列と呼ぶ。

$$\mathbf{P}^2\mathbf{1} = \mathbf{P}(\mathbf{P}\mathbf{1}) = \mathbf{P}\mathbf{1} = \mathbf{1}; \quad \mathbf{P}^2 \geq \mathbf{0}$$

であるから、 \mathbf{P}^2 も確率行列である。 $p_{ij}(2)$ を \mathbf{P}^2 の要素とすれば、行列の積の定義と斉時性より、

$$p_{ij}(2) = P[X_{t+2} = j | X_t = i]$$

が示される。したがって、 $p_{ij}(2)$ は状態 i から状態 j への 2 ステップ推移確率である。同様にして、 \mathbf{P}^n の要素 $p_{ij}(n)$ は n ステップ推移確率であることが示される。

$\pi_i(n) = P[X_n = i]$ を時点 n での状態確率、 $\pi_i(n)$ を要素とするベクトル $\pi(n) = (\pi_i(n))$ を状態確率ベクトルと呼ぶ。マルコフ性より

$$\begin{aligned} \pi_j(n+1) &= \sum_i P[X_n = i, X_{n+1} = j] \\ &= \sum_i \pi_i(n) P[X_{n+1} = j | X_n = i] \end{aligned}$$

であるから、これらを行列形式で書けば

$$\pi^\top(n+1) = \pi^\top(n)\mathbf{P} \quad (4)$$

が得られる。ただし \top は転置を表わす。初期確率ベクトルを $\alpha = \pi(0)$ とすれば、(4) を繰り返して用いることにより

$$\pi^\top(n) = \alpha^\top \mathbf{P}^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5)$$

が示される。

4. 有限マルコフ連鎖における興味

以上の準備の下で、有限マルコフ連鎖の何に興味があるのかに話を移そう。まず、どの状態も互いに到達可能、すなわち既約な有限マルコフ連鎖を考える。このセッティングでの最大の興味は

- 十分に時間が経過した後にならぬか?

ということである。既約な有限マルコフ連鎖に周期的な構造がなければ

¹本稿ではベクトルはすべて列ベクトルとする。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P[X_n = j | X_0 = i] = \pi_j > 0$$

が成立する (この場合をエルゴード的と呼ぶ). この初期状態に依存しない極限確率は (4) で

$$\pi = (\pi_i) = \lim_{n \rightarrow \infty} \pi(n)$$

とした定常分布として特徴付けられ,

$$\pi^T = \pi^T \mathbf{P}, \quad \pi^T \mathbf{1} = 1 \quad (6)$$

が成立する. (6) を定常方程式と呼び, エルゴード的なマルコフ連鎖の定常方程式はユニークな解を持つ. 定常分布を求めるということは, 数学的には線形方程式を解くことであるが, 状態数が多い場合には自明というわけではない [28]. ところで, 現実問題では推移確率行列 \mathbf{P} をデータから推定する必要があり, その推定法に関する研究も重要である (例えば [11] を見よ) が, OR としては, 推定値の誤差の与える影響を押さえておくことも重要であろう [26]. また, 確率分布 π が与えられたときに, π を定常分布を持つ推移確率行列 \mathbf{P} の特徴付け (逆問題) に関する研究もある [10].

ところで, 厳密な意味では, 有限時間では極限分布に到達することはできないわけで, このためマルコフ連鎖の極限分布 (エルゴード的なならば定常分布と同じ) へ収束する速さ, または極限分布との距離を押さえておくことが重要となる. エルゴード的な有限マルコフ連鎖の推移確率行列は

$$\mathbf{P} = \mathbf{1}\pi^T + \Delta \quad (7)$$

と分解できて, $\mathbf{1}\pi^T \Delta = \Delta \mathbf{1}\pi^T = \mathbf{0}$ が成立する. したがって

$$\mathbf{P}^n = \mathbf{1}\pi^T + \Delta^n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8)$$

が成立するので, Δ の絶対値最大の固有値を r_1 とすれば, 推移確率 $p_{ij}(n)$ は $\gamma = |r_1|$ の割合で極限確率に収束する. ところで, 状態数が多い場合には収束の速さを支配する値 γ を求めることは容易ではない. そこで, この γ を上からおさえる試みがいくつかなされている. [25] によれば

$$\tau(\mathbf{P}) = \frac{1}{2} \max_{i, j \in \mathcal{N}} \sum_k |p_{ik} - p_{jk}|$$

で定義される coefficient of ergodicity は $\tau(\mathbf{P}) \geq \gamma$ を満足し, マルコフ連鎖の収束の研究において重要な役割を演じる (γ の上限については他に [5, 7, 22] を見よ).

極限分布との距離を評価するために, 初期確率ベクトルを $\alpha = (\alpha_i)$ とし, 時点 n における状態確率を

$$p_{\alpha j}(n) = \sum_i \alpha_i p_{ij}(n), \quad j \in \mathcal{N},$$

状態確率ベクトルを $\pi_\alpha(n) = (p_{\alpha j}(n))$ と書くことにする. いま $\{\hat{X}_n\}$ を, $\{X_n\}$ と独立で, 初期分布として $\{X_n\}$ の定常分布 π , 推移確率行列として同じ \mathbf{P} を持つマルコフ連鎖とする. ここで

$$T = \inf\{n : X_n = \hat{X}_n\}$$

とおけば, T は 2 つのマルコフ連鎖が初めて一致する時点を表わす確率変数で coupling time と呼ばれている. さて, T 以降は 2 つのマルコフ連鎖は (確率的に) 同じ振舞いをするので (強マルコフ性より)

$$P[X_n = j, n \geq T] = P[\hat{X}_n = j, n \geq T]$$

が成立する. よって

$$\begin{aligned} & |p_{\alpha j}(n) - \pi_j| \\ &= |P[X_n = j] - P[\hat{X}_n = j]| \\ &= |P[X_n = j, n < T] - P[\hat{X}_n = j, n < T]| \\ &\leq P[X_n = j, n < T] + P[\hat{X}_n = j, n < T] \end{aligned}$$

であるから, j に関して和をとれば

$$\|\pi_\alpha(n) - \pi\|_1 \leq 2P[T > n]$$

が得られる. したがって T の分布の裾 $P[T > n]$ を知ることによって極限分布との距離を評価することができる (詳しくは [21] を参照). また評価尺度として separation

$$s_\alpha(n) = 1 - \min_{j \in \mathcal{N}} \frac{p_{\alpha j}(n)}{\pi_j}$$

および variation distance

$$d_\alpha(n) = \max_{ACN} \left| \sum_{j \in A} \{p_{\alpha j}(n) - \pi_j\} \right|$$

が使われることも多い. [4] によれば $d_\alpha(n) \leq s_\alpha(n)$ が成立し, 応用上は separation を押さえておくことが重要である. separation の評価に関しては [15] を見よ.

次に吸収状態を持つ有限マルコフ連鎖を考えよう. 最初に挙げた 2 つの例はいずれも吸収マルコフ連鎖でモデル化される². 吸収状態があれば, その吸収状態から他の状態へ到達できないので, 吸収マルコフ連鎖は既約ではありえない. したがってエルゴード的ではなくて, 必ず吸収状態のどれかに吸収される (例 1 では倒産, 例 2 では死亡が吸収状態). 有限吸収マルコフ連鎖における興味は

²例 2 では決定の要素を含んでいるのでマルコフ決定過程の範疇で考えるべきであろうが, 決定の要因数が少ない場合には各政策に対応するマルコフ連鎖を定式化しておいて, 各政策のパフォーマンスを比較すればよい.

- 吸収状態へ吸収されるまでの時間(初到達時間)の確率分布, またはその平均や分散などの特性値;
- 吸収状態が複数ある場合には, どの吸収状態に吸収されるかという確率;

などであろう。吸収までの時間を表わす確率変数を T とすると, この T の従う分布は相型分布と呼ばれ [23], T の分布の性質に関する研究も多い(例えば [20] を参照)。

ところで, 有限吸収マルコフ連鎖では有限時間内に必ずどこかに吸収されるのであるが, T が十分に長くて, 吸収される前に統計的な均衡に到達していることがある。例えば, ある生命体の個数をマルコフ連鎖でモデル化する場合には, 状態数 0 は明らかな吸収状態である。しかし現存している種の場合にはまだ吸収されていないわけで, しかも我々が観測できる時間のスパンにおいてはある種の均衡に達していると考えられる。このような平衡状態を特徴付けるものとして考えられているのが準定常分布(quasi-stationary distribution)である。非常に小さな確率でしか吸収されない吸収マルコフ連鎖を想定し, 実際に計算機でシミュレーションを行なってみてほしい。問題によってはなかなか吸収されないことがわかるであろう([24]では化学のイオン反応のシミュレーション実験を行なっている)。

いま, 興味の対象の部分空間を $S \subset \mathcal{N}$ とし, S 以外の状態への初到達時間を T とする。ここで, まだ吸収されていないという事象 $\{T > n\}$ を考えて,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P[X_n = j | X_0 = i, T > n] = q_j \quad (9)$$

が存在し $j \in S$ に関する和が 1 となる(すなわち S 上の確率分布となる)場合に, この確率分布を準極限分布と呼ぶ。代数的には, 推移確率行列 P の S に関する部分行列を T とすれば, T は

$$T \mathbf{1} \leq \mathbf{1}; \quad T \geq O \quad (10)$$

を満たし, このような行列を劣確率行列と呼ぶ((3)と比較せよ)。Perron-Frobenius (PF) の定理より, 既約性の条件の下で,

$$\gamma \mathbf{q}^T = \mathbf{q}^T T, \quad \mathbf{q}^T \mathbf{1} = 1 \quad (11)$$

を満たすベクトル $\mathbf{q} = (q_j)$ が唯一存在し ($q_j > 0$), この \mathbf{q} が準極限分布となる。(11)を満たすベクトル \mathbf{q} は準定常分布として特徴付けられ, (11)を準定常方程式と呼ぶ。(11)を(6)と比較すると, 準定常方程式では PF 固有値 γ を計算する必要があるが, 定常方程式では(確率

行列の PF 固有値は 1 であるから) PF 固有値を計算する必要がない。したがって準定常分布の数値計算法の開発 [24] や上下限の導出 [13, 16] が重要となる³。

5. 無限マルコフ連鎖

待ち室に制限のない待ち行列モデルにおいて系内数を考える場合には, 状態空間は可算無限個と考えるのが普通であり, したがって状態数が無限のマルコフ連鎖も広い応用範囲を持つ。状態数が無限の場合でも無限次元の推移確率行列を想定し, 有限次元のときの類推を考えればかなりの議論は平行して行えるが, ある部分では有限のときには起こり得ない状況が発生し数学的には非常に厄介になる場合がある。その代表例が無限次元の定常方程式(6)の数値解法であろう。このために一般的に行われているのが, 無限マルコフ連鎖を有限マルコフ連鎖で近似する方法であろう。この際に問題となるのが

- この方法は近似として意味を持つか?

である。すなわち P_n を P から作られた状態数 n のエルゴード的な推移確率行列 (P_n を確率行列にするための操作が必要である) とし π_n をこの定常分布としたときに,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \pi_n = \pi$$

が保証されている必要がある [8]。ただし π は無限マルコフ連鎖の定常分布である。

ところで待ち行列の例では, サービスの能力が客の要求仕事量を上回っていれば安定的であり, 待ち行列長が発散することはない。つまり, ある有限の観測期間内には行列長の上限が存在し, もしその期間内に統計的な均衡状態に到達していれば, この定常状態は有限の準定常分布で近似されるであろう。つまり, 無限マルコフ連鎖の推移確率行列 P の状態数 n での truncation を T とし, この劣確率行列の準定常分布を q_n とすれば, q_n の n に関する振舞いや q_n と π_n および π との関係などにも興味がある [14]。

無限マルコフ連鎖における準定常分布(11)と条件付き極限確率(9)に話を移そう。これらの問題は数学的に大変難しく, 準定常分布が存在するための必要十分条件に関する研究がまだ続けられている [6]。出生死滅過程や右への skip-free 過程⁴の場合 [14, 30] が示すように, 準定常分布がユニークに定まる場合もあれば無限個存在す

³この場合の上下限は確率順序の意味で与えられる。確率順序については [17, 29] を見よ。

⁴右(上)方向へは隣の状態へしか移動できないマルコフ連鎖を右への skip-free 過程, 左(下)方向へは隣の状態へしか移動でき

る場合もあり、一般のマルコフ連鎖においてどうなるのかなどは未解決のままである。しかし、多くの待ち行列モデルを特別な場合として含む準出生死滅過程の (busy period が長く続いた場合に対応する) 準定常分布に関する結果が最近いくつか得られている [3, 18]。準極限分布 (9) の存在に関しては、出生死滅過程の場合には (現実的でない一つの場合を除いて) 完全に解決された [19] が、一般の場合には何もわかっていないのが現状であり、この問題に関して現在の最も一般的な結果は [12] である。ただし [12] の結果は準出生死滅過程の場合をカバーしている [18] ので、応用上は大変にありがたい結果である。

参考文献

- [1] 森村英典 (1974), 確率・統計, 朝倉書店.
- [2] Anderson, W.J. (1991) *Continuous-time Markov Chains: Applications-oriented approach*, Springer.
- [3] Bean, N.G., Bright, L., Latouche, G., Pearce, C.E.M., Pollett, P.K. and Taylor, P.G. (1996) The quasistationary behaviour of quasi-birth-and-death-processes. *Ann. Appl. Prob.*, to appear.
- [4] Diaconis, P. and Fill, J.A. (1990) Strong stationary times via a new form of duality. *Ann. Prob.*, **18**, 1483–1522.
- [5] Diaconis, P. and Stroock, D. (1991) Geometric bounds for eigenvalues of Markov chains. *Ann. Appl. Prob.*, **1**, 36–61.
- [6] Ferrari, P.A., Kesten, H., Martínez, S. and Picco, P. (1995) Existence of quasi-stationary distributions: A renewal dynamical approach. *Ann. Prob.*, **23**, 501–521.
- [7] Friedland, S. and Gurvits, L. (1994) An upper bound for the real part of nonmaximal eigenvalues of nonnegative irreducible matrices. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, **15**, 1015–1017.
- [8] Heyman, D.P. (1991) Approximating the stationary distribution of an infinite stochastic matrix. *J. Appl. Prob.*, **28**, 96–103.
- [9] Jarrow, R.A., Lando, D. and Turnbull, S.M. (1994) A Markov model for the term structure of credit risk spreads. Working paper, Cornell Univ.
- [10] Karr, A.F. (1978) Markov chains and processes with a prescribed invariant measure. *Stoch. Proc. Appl.*, **7**, 277–290.
- [11] Karr, A.F. (1990) *Markov Processes* (木島による邦訳あり; 確率モデルハンドブック, 90–117, 朝倉書店).
- [12] Kesten, H. (1995) A ratio limit theorem for (sub)Markov chains on $\{1, 2, \dots\}$ with bounded jumps. *Adv. Appl. Prob.*, **27**, 652–691.
- [13] Kijima, M. (1992) Evaluation of the decay parameter for some specialized birth–death processes. *J. Appl. Prob.*, **29**, 781–791.
- [14] Kijima, M. (1993) Quasi-limiting distributions of Markov chains that are skip-free to the left in continuous-time. *J. Appl. Prob.*, **30**, 509–517.
- [15] Kijima, M. (1994) On separation for birth–death processes. *Prob. Eng. Inf. Sci.*, **8**, 51–68.
- [16] Kijima, M. (1995) Bounds for the quasi-stationary distributions of some specialized Markov chains. *Math. Comp. Modelling*, **22**, 141–147.
- [17] Kijima, M. (1996) *Markov Processes for Stochastic Modeling*, Chapman & Hall.
- [18] Kijima, M. and Makimoto, N. (1997) Quasi-stationary distributions of Markov chains arising from queueing processes: A review. *Recent Contributions in Applied Probability and Stochastic Processes*, Shanthikumar, J.G. and Sumita, U. Ed., to appear.
- [19] Kijima, M., Nair, M.G., Pollett, P.K. and van Doorn, E.A. (1997) Limiting conditional distributions for birth–death processes. *Adv. Appl. Prob.*, **29**, to appear.
- [20] Li, H. and Shaked, M. (1996) Aging first-passage times. *Encyclopedia of Statistical Sciences*, Wiley.
- [21] Lindvall, T. (1992) *Lectures on the Coupling Method*, Wiley.
- [22] Lund, R. and Tweedie, R.L. (1996) Geometric convergence rates for stochastically ordered Markov chains. *Math. Oper. Res.*, **21**, 182–194.
- [23] Neuts, M.F. (1981) *Matrix-Geometric Solutions in Stochastic Models — An Algorithmic Approach*, Johns Hopkins University Press.
- [24] Parsons, R.W. and Pollett, P.K. (1987) Quasistationary distributions for autocatalytic reactions. *J. Stat. Physics*, **46**, 249–254.
- [25] Seneta, E. (1991) Applications of ergodicity coefficients to homogeneous Markov chains. *Proceedings of the Doeblin Conference*, Cohn, H. Ed., AMS Series: Contemporary Mathematics.
- [26] Seneta, E. (1993) Sensitivity of finite Markov chains under perturbation. *Stat. Prob. Letters*, **17**, 163–168.
- [27] Sonnenberg, F.A. and Beck, R.J. (1993) Markov models in medical decision making: A practical guide. *Medical Decision Making*, **13**, 322–338.
- [28] Stewart, W.J. (1994) *Introduction to the Numerical Solution of Markov Chains*, Princeton University Press.
- [29] Szekli, R. (1995) *Stochastic Ordering and Dependence in Applied Probability*, Lecture Notes in Statistics, **97**, Springer.
- [30] van Doorn, E.A. (1991) Quasi-stationary distributions and convergence to quasi-stationarity of birth–death processes. *Adv. Appl. Prob.*, **23**, 683–700.

ない場合を左への skip-free 過程, 両方向へ隣の状態へしか移動できないマルコフ連鎖を出生死滅過程と呼ぶ。