マルコフ連鎖と混合時間

白井　朋之

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所

マルコフ連鎖は確率過程の中でもっとも基本的かつ重要なものである．本稿では，マルコフ連鎖の基礎的な概念を例を通して紹介した後，混合時間とカットオフ現象について説明する．コンピュータ内で実現されるものを想定して，離散時間で有限集合 S に値をとる有限マルコフ連鎖のみを扱う．

1.1　マルコフ連鎖の定義

状態空間 S 上の (離散時間) 確率過程とは, 確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ 上で定義された有限集合 S に値をとる確率変数列 $\{X_t,\ t=0,1,\dots\}$ のことをいう．状態空間 S 上のマルコフ連鎖とは, S 上の確率過程でマルコフ性とよばれる以下の性質を持つものである : 任意の $0 \le t_1 < t_2 < \cdots < t_n < t$ と $x_0, x_1, \dots, x_n, x \in S$ に対して,

$$\mathbb{P}(X_t = x \mid X_{t_0} = x_0, X_{t_1} = x_1, \dots, X_{t_n} = x_n) = \mathbb{P}(X_t = x \mid X_{t_n} = x_n).$$

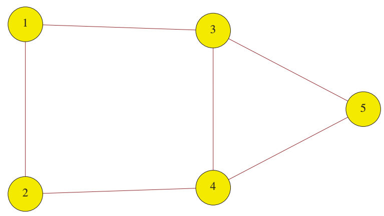
特に，マルコフ連鎖 $X = \{X_t\}$ に対して，$\mathbb{P}(X_{t+1} = y \mid X_t = x)$, $x, y \in S$ が t によらないとき，X は時間的に一様なマルコフ連鎖といい，x から y への 1 ステップの推移確率 $p(x,y) := \mathbb{P}(X_{t+1} = y \mid X_t = x)$, $x, y \in S$ により定まる $|S| \times |S|$ 行列 $P = (p(x,y))_{x,y \in S}$ を推移確率行列という．時間的に一様なマルコフ連鎖を与えることは，1 ステップの推移の確率法則，つまり推移確率行列 P を与えることと同値である．

補題 1.1 時間的に一様なマルコフ連鎖について，任意の $s, t = 0, 1, \dots$ と任意の $x, y \in S$ に対して，$\mathbb{P}(X_{t+s} = y \mid X_s = x) = P^t(x,y)$ となる．

このことより,「原理的」にはマルコフ連鎖の基本的な観測量は推移行列 P のべき乗を考えることによりすべて得られる．

1.2　マルコフ連鎖の例

例 1.2 有限グラフ上の単純ランダムウォーク (Simple random walk, SRW)．　有限グラフ $G = (V, E)$ を考える．有限グラフ上の SRW とは, V を状態空間として, 各頂点 x から隣接点に等確率 $\deg(x)^{-1}$ で遷移するものとして推移確率を定義したものである．ただし, $\deg(x)$ は頂点 x の次数で，例えば，以下の図において $\deg(1) = \deg(2) = \deg(5) = 2$, $\deg(3) = \deg(4) = 3$ である．



$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 1/3 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 \\ 0 & 1/3 & 1/3 & 0 & 1/3 \\ 0 & 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}$$

例 1.3 エーレンフェストの壺のモデル．　2 つの壺 A, B の中に合せて n 個の球が入っている．それぞれの玉には 1 から n の番号が一つずつ書いてある．ランダムに 1 から n までの中から数字を選んで，その番号の書いてある球を壺から取りだし別の壺に移す．このとき，壺 A の中にある球の個数に着目すると，状態空間 $S = \{0, 1, 2, \ldots, n\}$ 上のマルコフ連鎖で推移確率が

$$p(k, k-1) = \frac{k}{n}, \quad p(k, k+1) = \frac{n-k}{n} \qquad (k = 0, 1, 2, \ldots, n)$$

となるものが対応する．

例 1.4 超立方体上の SRW．　$S = \{0, 1\}^n$ とする．$n = 2$ のときは S は正方形の各頂点と，$n = 3$ のときは S は立方体の各頂点と同一視できる．推移確率行列は $2^n \times 2^n$ になるのでこれをすべて書き下すのは現実的でない．このような場合は，アルゴリズム的に書くとわかりやすい．$x = (x_1, \ldots, x_n) \in S$ の推移を以下で定義する：

(1) 一様ランダムに $\{1, 2, \ldots, n\}$ から座標 i を選ぶ．

(2) $x_i = 0$ ならば $x_i = 1$ に，$x_i = 1$ ならば $x_i = 0$ にアップデートする．一つの式で書けば，$x_i \mapsto 1 - x_i$ である．

例えば，$n = 5$ のときの推移の様子は以下のようになる．

$$(1,0,1,1,0) \xrightarrow{3} (1,0,0,1,0) \xrightarrow{5} (1,0,0,1,1) \xrightarrow{2} (1,1,0,1,1) \xrightarrow{3} (1,1,1,1,1) \xrightarrow{1} \cdots$$

矢印の上の数字は，ステップ (1) でランダムに選ばれる座標をあらわす．1 と 0 のかわりにアップスピンとダウンスピンをあらわす矢印に置きかえれば，

$$(\uparrow,\downarrow,\uparrow,\uparrow,\downarrow) \xrightarrow{3} (\uparrow,\downarrow,\downarrow,\uparrow,\downarrow) \xrightarrow{5} (\uparrow,\downarrow,\downarrow,\uparrow,\uparrow) \xrightarrow{2} (\uparrow,\uparrow,\downarrow,\uparrow,\uparrow) \xrightarrow{3} (\uparrow,\uparrow,\uparrow,\uparrow,\uparrow) \xrightarrow{1} \cdots$$

のようになり，磁石のモデル（イジング模型）の時間発展のようにも見なせる．

特に，X_t の 1 の個数 $N_t = \sum_{i=1}^n (X_t)_i$ は，例 1.3 で述べたエーレンフェストの壺と同じマルコフ連鎖を定めることがわかる．

例 1.5 q-彩色全体上のマルコフ連鎖．　$G = (V, E)$ を有限グラフとする．$q > \max_{x \in S} \deg(x)$ なる自然数を固定して，写像 $c \colon V \to \{1, 2, \ldots, q\}$ を考える．これは，色の種類が q 種類あって，グラフ上の点 v を $c(v)$ と彩色することをあらわす．各点に 1 から q までのいずれかを割り振っていると考えてもよい．写像 c を q-彩色といい，その全体を状態空間 S とする．また，$vw \in E$ のとき，つまり v と w がグラフ上で隣接しているとき，$c(v) \neq c(w)$ となるような写像 c をプロパー q-彩色といい，その全体からなる S の部分集合を S_{proper} とあらわす．一般のグラフ G の場合には S_{proper} の個数自体はっきりしないが，このときにも，アルゴリズム的に S 上のマルコフ連鎖 $\{c_t\}$ を定義することができる：

(1) V の一点を一様ランダムに選ぶ．

(2) (1) で $v \in V$ が選ばれたとき，$A_v(c_t) = \{1, 2, \ldots, q\} \setminus \{c_t(w); vw \in E\}$ を頂点 v を彩色可能な色の集合とし，$A_v(c_t)$ から一様に色を選んで，$c_{t+1}(v)$ をその色にアップデートし，他の点の色はそのままとする．

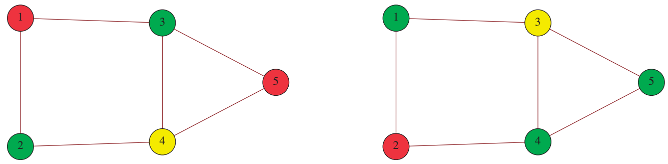


図 1：左はプロパー 3-彩色である．右は 3-彩色であるがプロパー 3-彩色ではない．

注意 1.6 図 1 では 3-彩色としたが，もちろん $k \geq 3$ ならば k-彩色でもある．

1.3 既約性と周期性

定義されたマルコフ連鎖が状態空間全体を行き渡るかどうかはまず考えるべき問題である．

定義 1.7 任意の $x, y \in S$ に対して，ある $t = t_{x,y}$ が存在して $\mathbb{P}(X_t = y \mid X_0 = x) > 0$ となるとき，S 上のマルコフ連鎖 X は既約 (irreducible) であるという．

定義 1.8 $\mathcal{P}(x) := \{t \geq 1 \mid \mathbb{P}(X_t = x \mid X_0 = x) > 0\}$ とおく．$\mathcal{P}(x)$ の最大公約数を状態 $x \in S$ の周期という．X が既約であるとき，各状態の周期はすべて等しいことが知られている．このとき，その値をマルコフ連鎖 X の周期といい，周期が 1 であるとき，X は非周期的 (aperiodic) であるという．

例 1.9 図 2 は，チェスのビショップとナイトの動きをあらわしたものである．状態空間 S をチェス盤の 64 個のマス目とし，推移のルールは各駒の到達可能なマス目を一様ランダムに選ぶ．図 2 のときは，ビショップの場合 $\frac{1}{13}$ の確率で推移可能なマス目を選び，ナイトの場合は $\frac{1}{8}$ でマス目を選ぶことになる．このような推移を繰り返すことにより得られるマルコフ連鎖をそれぞれランダムビショップムーブ，ランダムナイトムーブという．

(既約性) ランダムビショップムーブは既約でない．実際，推移のルールから初期位置と同じ色のマス目の上のみを動き，別の色のマス目に移る確率は 0 である．一方，ランダムナイトムーブは既約であることが示される（何故か？）．

(周期性) ランダムナイトムーブは周期 2 である．実際，推移のルールから一回のジャンプでは，初期位置と違う色のマス目にしか移動できない．よって，元の場所には偶数回のジャンプの後にしか戻れない．ランダムビショップムーブは非周期的である．

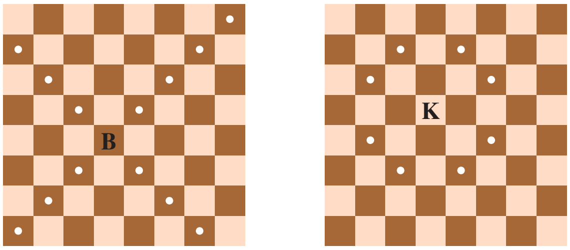


図 2：ビショップ（角）とナイト（八方桂馬）の動き方．白丸のマス目にジャンプ可能．

1.4 定常分布と可逆分布

マルコフ連鎖の $t \to \infty$ で挙動は重要である．マルコフ連鎖の無記憶性より，（ある弱い条件のもと）初期状態によらず X_t の分布は定常分布とよばれる確率分布へ収束する．

定義 1.10 S 上の確率分布 π がマルコフ連鎖 X の定常分布であるとは，

$$\sum_{x \in S} \pi(x)p(x,y) = \pi(y)$$

をみたすときをいう．また，詳細釣り合い (detailed balance) の式

$$\pi(x)p(x,y) = \pi(y)p(y,x), \quad \forall x, y \in S$$

が成り立つとき，π は可逆分布であるという．

命題 1.11 π が可逆分布ならば，定常分布である．

注意 1.12 (1) 任意の閉路 $(x_1, x_2, \ldots, x_n, x_1)$ に対して，

$$p(x_1,x_2)p(x_2,x_3)\cdots p(x_n,x_1) = p(x_1,x_n)p(x_n,x_{n-1})\cdots p(x_2,x_1)$$

となること，つまり任意の閉路に対して右廻りと左廻りの確率が等しくなることが可逆分布が存在するための必要十分条件である．
(2) 可逆分布が存在するとき，詳細釣り合いの式によりすべての点の比が決定可能である．

例 1.13 例 1.3 のマルコフ連鎖は，$\pi(k) = \binom{n}{k}2^{-n}$ を可逆分布として持つことが確かめられる．実際，$\tilde{\pi}(0) = 1$ として詳細釣り合いの式 $\tilde{\pi}(k)\frac{n-k}{n} = \tilde{\pi}(k+1)\frac{k+1}{n}$, $k = 0, 1, \ldots, n-1$ を解くと $\tilde{\pi}(k) = \binom{n}{k}$ が得られるので，確率分布になるように $\pi(k) = \tilde{\pi}(k)/\sum_{j=0}^{n}\tilde{\pi}(j)$ とすればよい．

例 1.14 n 点からなるサイクルグラフを C_n とあらわす．C_n 上の SRW は既約である．奇サイクルの場合は非周期的で，偶サイクルの場合は周期 2 となる．ともに一様分布が可逆分布となる．また，C_n 上のマルコフ連鎖で，各頂点での推移確率が，時計廻りに確率 p $(\neq 1/2)$，反時計廻りに確率 $q = 1 - p$ $(\neq 1/2)$ となるものを考えると，定常分布が一様分布となることはすぐに確かめられるが，注意 1.12 (1) によると可逆分布でないことがわかる．

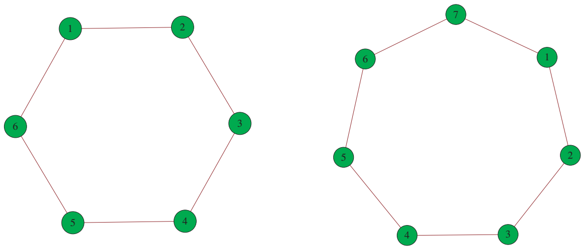


図 3：偶サイクル C_6 と奇サイクル C_7

命題 1.15 例 1.2 で扱った有限グラフ $G=(V,E)$ 上の SRW の場合，定常分布は $\pi(x)=\frac{\deg(x)}{2|E|}$ で与えられる．$\pi(x)$ は可逆分布でもある．

定理 1.16 (1) 有限マルコフ連鎖 X が既約ならば，定常分布はただ一つ存在する．
(2) 有限マルコフ連鎖 X が既約かつ非周期的のとき，初期状態が $x\in S$ のときの X_t の分布 $\mathbb{P}(X_t=\cdot\mid X_0=x)=P^t(x,\cdot)$ は $t\to\infty$ で $x\in S$ によらず定常分布 π に収束する．つまり，推移確率行列の t 乗 P^t は行列 Π に収束する．ただし，$\Pi(x,y)=\pi(y)$ $(x,y\in S)$ である．

命題 1.17 既約マルコフ連鎖の推移確率が，任意の $x,y\in S$ に対して $p(x,y)=p(y,x)$ をみたせば，一様分布 $\pi(x)=\frac{1}{|S|}$, $\forall x\in S$ は可逆分布，特に定常分布である．

例 1.18 例 1.2 のマルコフ連鎖において，命題 1.15 により $\pi=(\frac{1}{6},\frac{1}{6},\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{6})$ である．また既約で非周期的であるから定理 1.16 (2) により，

$$P^t=\begin{pmatrix}0&1/2&1/2&0&0\\1/2&0&0&1/2&0\\1/3&0&0&1/3&1/3\\0&1/3&1/3&0&1/3\\0&0&1/2&1/2&0\end{pmatrix}^t\to\begin{pmatrix}1/6&1/6&1/4&1/4&1/6\\1/6&1/6&1/4&1/4&1/6\\1/6&1/6&1/4&1/4&1/6\\1/6&1/6&1/4&1/4&1/6\\1/6&1/6&1/4&1/4&1/6\end{pmatrix}=\Pi\qquad(t\to\infty)$$

となることがわかる．

注意 1.19 推移確率 P の既約マルコフ連鎖で，$p(x,x)>0$ となる点が一つでも存在すれば非周期的となる．定理 1.16 (2) を用いるために，しばしばマルコフ連鎖の怠惰版 (lazy version) を用いることがある．これは，$P=(p(x,y))$ から

$$q(x,y)=\begin{cases}\frac{1}{2}p(x,y), & y\neq x\\ \frac{1}{2}+\frac{1}{2}p(x,x), & y=x\end{cases}$$

と定まる推移確率をもつマルコフ連鎖のことである．推移確率行列で書けば，$Q=\frac{1}{2}(I+P)$ であり，公平なコインを投げて表ならば P で定まるマルコフ連鎖の推移を行ない，裏ならばその場に留まる，というマルコフ連鎖をあらわす．Q の定常分布は P のものと一致し，P が周期的な場合も Q は非周期的となる．

例 1.20 既約ではないが，時間が十分経つと既約成分に落ち着く例． $G=(V,E)$ は連結有限グラフで，$q > \max_{x\in S}\deg(x)$ とする．例 1.5 において，G の q-彩色全体を状態空間 S とするマルコフ連鎖が定義された．推移ルールのステップ (1) で選ばれた頂点にはステップ (2) で隣接点と違う色が彩色される．よって，どんな彩色からスタートしても，ステップ (1) ですべての点が少なくとも一度選ばれれば q-プロパー彩色となる．また，一度プロパー q-彩色 c に到達すれば，その後プロパー q-彩色にしか推移しない．つまり，S_{proper} は閉じている．状態空間 S 全体でのマルコフ連鎖は既約でないが，S_{proper} 上のマルコフ連鎖は既約となる．S_{proper} のような集合を S 上のマルコフ連鎖の既約成分ということもある．また，推移ルールについて少し考察すると，命題 1.17 により定常分布は S_{proper} 上の一様分布になることがわかる．

1.5 クーポンコレクターの問題

様々な問題に応用されるクーポンコレクターの問題を考える．

問題 ある会社が n 種類のクーポン（カード）をあるお菓子のおまけとして発行している．このクーポンを全種類集めたいと思っている人がいるとする．一つお菓子を買うと一枚ずつ等確率 $1/n$ でクーポンを手にする．全種類のクーポンを手に入れるためには，大体何個くらいお菓子を買えばよいか?

この問題はマルコフ連鎖 $\{X_t\}_{t\geq 0}$ の問題として定式化される．$S=\{0,1,2,\dots,n\}$ は手持ちのクーポンの種類をあらわす状態空間．k 種類のクーポンを持っている状態で新しいクーポンを得る確率は $\frac{n-k}{n}$ であるから，推移確率は

$$p(k,k)=\frac{k}{n},\quad p(k,k+1)=\frac{n-k}{n}\qquad (k\in S)$$

と与えられる．自然数に値をとる確率変数 τ_n を

$$\tau_n=\inf\{t\in\mathbb{N}; X_t=n\}$$

とおくと，初めてクーポンが全種類（n 種類）集まる時間をあらわす．上の問題は確率変数 τ_n の性質を調べることと言いかえられる．例えば，以下の事実を簡単に示すことができる．

命題 1.21 (1) $E[\tau_n]=n\sum_{k=1}^n\frac{1}{k}\sim n\log n$. (2) $\lim_{n\to\infty}P(\tau_n\leq n\log n+cn)=e^{-e^{-c}}$ $(c\in\mathbb{R})$.

つまり，クーポンを集めるまでの平均時間は約 $n\log n$ で，$n\log n$ を越えても全種類のクーポンが集っていない確率は指数的に小さくなる．例えば，$n=100$ のとき，$E[\tau_{100}]=518.738\cdots$ である．図 5 は $n=100$ として τ_{100} を 10000 回シミュレーションした結果である．実線は，命題 1.21 (2) から得られる理論値である．

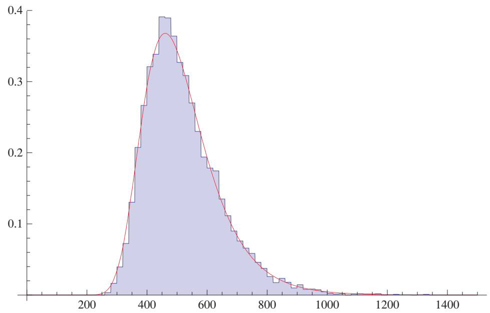


図 4：τ_{100} のヒストグラムと極限分布.

1.6 混合時間

有限マルコフ連鎖は既約かつ非周期的ならば定常分布に収束することを定理 1.16 で述べた．以下ではその収束のスピードに関して議論する．そのために，状態空間 S 上の確率分布の全体 $\mathcal{P}(S)$ 上に距離を導入すると便利である．確率分布は行ベクトル $\pi = (\pi(x))_{x \in S}$ とみなす．

定義 1.22 $\mu, \nu \in \mathcal{P}(S)$ に対して，

$$\|\mu - \nu\|_{TV} = \max_{A \subset S} |\mu(A) - \nu(A)|$$

と定義される距離を全変動距離 (total variation distance) という．

全変動距離は以下のような別の表現ももつ．

命題 1.23 $0 \leq \|\mu - \nu\|_{TV} \leq 1$ で，

$$\begin{aligned}\|\mu - \nu\|_{TV} &= \frac{1}{2}\sum_{x \in S} |\mu(x) - \nu(x)| = \sum_{\substack{x \in S \\ \mu(x) \geq \nu(x)}} |\mu(x) - \nu(x)| \\ &= \inf\{P(X \neq Y) \mid (X, Y) \text{ は } (\mu, \nu) \text{ のカップリング }\}\end{aligned}$$

ここで，X の周辺分布が μ，Y の周辺分布が ν となるような 2 次元確率変数 (X, Y) を (μ, ν) のカップリングであるという．

注意 1.24 X が既約かつ非周期的のとき，定理 1.16 と S が有限集合であることを考慮すると，$d(t) := \max_{x \in S} \|P^t(x, \cdot) - \pi\|_{TV} \to 0$ であると言える．さらに，$d(t)$ は単調減少（単調非増加）であることが知られている．

定義 1.25 混合時間 (mixing time) を以下のように定義する．

$$t_{\mathrm{mix}}(\epsilon) := \inf\{t \in \mathbb{N} \mid d(t) \leq \epsilon\}$$

と定義し，特に $t_{\mathrm{mix}} := t_{\mathrm{mix}}(1/4)$ と定義する．1/4 は 1/2 以下ならば本質的には何でもよい．

混合時間とはマルコフ連鎖がほぼ定常分布に近づいた時間をあらわし，最近，以下の問題が色々な例で調べられている．

問題 増大する状態空間の列 $\{S_n,\ n \in \mathbb{N}\}$ と S_n 上のマルコフ連鎖 $X^{(n)} = \{X_t^{(n)}\}$ が与えられているとすると，各 $(X^{(n)}, S_n)$ に対して，$d_n(t)$ や $t_{\mathrm{mix}}^{(n)}$ が定義される．$t_{\mathrm{mix}}^{(n)}$ の $n \to \infty$ での挙動を調べよ．

例えば，コンピュータシミュレーションによりある集合 S の中から一様にサンプリングをしたいとき，しばしば定常分布が S 上の一様分布となるマルコフ連鎖が用いられる (Markov Chain Monte Carlo, MCMC)．十分時間が経てばマルコフ連鎖 X_t の分布は一様分布に近づいているので，十分大きい t に対する X_t をもって一様サンプリングしたことにするのである．この際，どれくらいの時間が経てば定常分布に近づいているかを見積るために上のような問題が意味を持ってくる．「X_t の分布は $t \to \infty$ で定常分布に収束する」という事実より少し詳しいことを調べることになる．

1.7 マルコフ連鎖のカップリング

定義 1.26 (1) 推移確率行列 P をもつ S 上のマルコフ連鎖で初期状態が x と y であるものの（マルコフ）カップリングとは，$S \times S$ 上のマルコフ連鎖で (X_t, Y_t) で，X_t だけに着目すると x 出発のマルコフ連鎖，Y_t だけに着目すると y 出発のマルコフ連鎖となっているものをいう．このカップリングの分布を $\mathbb{P}_{x,y}$ とあらわす．
(2)（マルコフ）カップリングのカップリング時間 τ_{couple} は，$\tau_{\mathrm{couple}} = \inf\{t \geq 0 \mid X_t = Y_t\}$ と定義される．

例 1.27 $S = \{0, 1, 2, \ldots, n\}$ 上の反射壁をもつマルコフ連鎖を考える．つまり，$\{1, 2, \ldots, n-1\}$ では等確率 $1/2$ で隣りにジャンプし，0 では 1 に，n では $n-1$ に確率 1 でジャンプする．このマルコフ連鎖の怠惰版で出発点が x と y のものを考える．これらのカップリングは以下のようにして構成される :「コインを投げて表ならば，もう一度コインを投げて X_t を動かす．裏ならば同様のことを Y_t について行う．」一回の操作で，X_t か Y_t の一方だけを動かしている．もし，Y_t の存在を忘れて X_t にだけ着目すると，出発点が x のマルコフ連鎖の怠惰版になっていることがわかる．このカップリングの著しい性質は，$x \leq y$ ならば, 任意の t に対して $X_t \leq Y_t$ となっていることにある．よって，事象の包含関係 $\{X_t = n\} \subset \{Y_t = n\}$ より，

$$P^t(x, n) = \mathbb{P}_{x,y}(X_t = n) \leq \mathbb{P}_{x,y}(Y_t = n) = P^t(y, n)$$

がわかる．任意の時刻 t に対して，右端 n にいる確率 $P^t(x, n)$ は，初期状態 x に関して単調増大であることが示された．

1.8 マルコフ連鎖のカップリングと混合時間の評価

カップリング時間の期待値は t_{mix} の上からの評価に用いられる．

命題 1.28 $t_{\mathrm{mix}} \le 4\max_{x,y\in S}\mathbb{E}_{x,y}[\tau_{\mathrm{couple}}]$. ただし，$\mathbb{E}_{x,y}$ は $\mathbb{P}_{x,y}$ による期待値をあらわす．

この評価から，混合時間の評価のためにはカップリング時間が小さくなるうまいカップリングを構成することが重要になる．以下 2 つの例を紹介する．

1.8.1 サイクル C_n 上のマルコフ連鎖の混合時間

例 1.14 の SRW の怠惰版 (LSRW) の混合時間を評価する．異なる初期状態から出発する LSRW のカップリング (X_t, Y_t) を以下のようにして構成する：

(1) コインを投げて表ならば X_t を推移させ，裏ならば Y_t を推移させる．

(2) $X_t = Y_t$ となった後は同じ状態を保ったまま，LSRW のルールで推移させる．

例えば，X_t のみに着目すると，C_n 上の LSRW となっていることは明らかであろう．このカップリングのカップリング時間を考えてみよう．X_t と Y_t のグラフ上の最短距離を Z_t とすると，$\{0, 1, \dots, \lfloor n/2 \rfloor\}$ 上のマルコフ連鎖となる（n の偶奇により $\lfloor n/2 \rfloor$ での動きが少しだけ違う）．よって，X_t と Y_t のカップリング時間は，Z_t が 0 へ初めて到達する時間に等しい．この時間の期待値は $O(n^2)$ であることが知られている．よって，命題 1.28 により，$t_{\mathrm{mix}} = O(n^2)$ であることがわかる．

1.8.2 超立方体上のマルコフ連鎖の混合時間

例 1.4 の怠惰版 (LSRW) の混合時間を評価してみよう．異なる初期状態から出発する LSRW のカップリング (X_t, Y_t) は以下のようにして構成される：

(1) 一様ランダムに $\{1, 2, \dots, n\}$ を選ぶ.

(2) コインを投げて表ならばその座標の値をともに 1, 裏ならばその座標の値をともに 0 とする．

以下は，$n = 5$ の場合のカップリングの例である．上段が X_t, 下段が Y_t をあらわす．

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \overset{3,\,表}{\to} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \overset{5,\,表}{\to} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \overset{3,\,裏}{\to} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \overset{1,\,表}{\to} \cdots$$

例えば，(1) で i 座標が選ばれたとき，(2) の操作は i 座標の値が 0 でも 1 でも確率 1/2 で変化せず，確率 1/2 で違う値にアップデートされる．よって，X_t, Y_t のいずれかに着目すると，例 1.4 の怠惰版になっていることがわかる．このカップリングにより，一度 (1) で選ばれた座標の値は以後ずっと一致している．よって，カップリング時間は，初期状態 x, y のうち値の異なる座標（上の例では $\{1, 3, 4\}$）すべてが (1) で選ばれる最初の時間である．これは，1, 3, 4 をまだ手にしていないクーポンとみなすと，1.5 節のクーポンコレクターの問題で考えた τ_n よりも小さい．ゆえに，$\mathbb{E}_{x,y}[\tau_{\mathrm{couple}}] \le \mathbb{E}[\tau_n] \le n\log n + n$. よって，命題 1.28 により $t_{\mathrm{mix}} \le 4(n\log n + n)$ と評価される．実際は，もっと詳しく $t_{\mathrm{mix}} \sim \frac{1}{2}n\log n$ であることが知られている．

1.9　カットオフ現象

カットオフ現象とは，混合時間 t_{mix} の前後で $d(t)$ の値が 1 から 0 へ急激に変化する現象のことをいう．X_t の分布がある時間を過ぎると急激に定常分布に近づく現象である．

定義 1.29 幅 w_n の窓のカットオフ現象が起こるとは，$w_n = o(t_{\text{mix}}^{(n)})$ かつ

$$\lim_{c\to-\infty} \liminf_{n\to\infty} d_n(t_{\text{mix}}^{(n)} + cw_n) = 1, \qquad \lim_{c\to+\infty} \limsup_{n\to\infty} d_n(t_{\text{mix}}^{(n)} + cw_n) = 0$$

となるときをいう．

カットオフ現象の定義は，$d_n(t)$ のグラフを $t = t_{\text{mix}}^{(n)}$ の前後で w_n の幅で拡大して $n \to \infty$ とすると，階段関数となることを示している．例えば，超立方体の SRW の怠惰版では $t_{\text{mix}}^{(n)} = \frac{1}{2} n \log n$ で幅 n の窓のカットオフ現象が起きる．一方，C_n 上の単純ランダムウォークではカットオフ現象は起きないことが知られている．

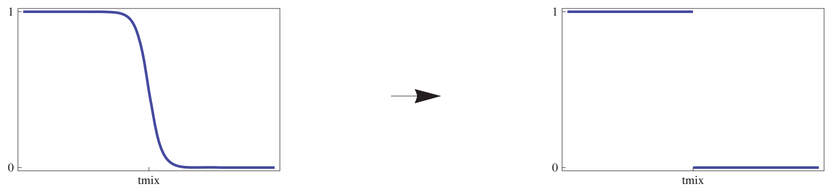


図 5：カットオフ現象のイメージ．$d_n(t)$ のグラフ．

1.10　最後に

マルコフ連鎖と混合時間の基本概念について述べた．紙幅の関係で t_{mix} の評価はカップリングの方法による上からの評価についてのみ説明したが，下からの評価も含めて様々な評価の方法が知られている．詳しくは参考文献 [2] をお薦めする．確率論のテキストとしては例えば [1] などが参考になる．

参考文献

[1] R. Durrett, *Probability: theory and examples*, Fourth edition, Cambridge University Press, Cambridge, 2010.

[2] D. A. Levin, Y. Peres and E. L. Wilmer, *Markov Chains and Mixing Times*, Amer. Math. Soc., providence, RI, 2009.