

連続時間マルコフ連鎖における 過渡状態確率の数値計算

井上 文彰

待ち行列モデルの解析では、性能指標の定常分布だけでなく過渡状態確率に興味があることが少なくない。過渡状態確率の数値計算は、離散時間マルコフ連鎖では行列積を用いて容易に実行可能である一方、連続時間マルコフ連鎖では特有の工夫が必要となる。本稿では、連続時間斉時マルコフ連鎖における過渡状態確率の安定な数値計算法である一様化法を紹介し、さらに、その連続時間非斉時マルコフ連鎖への拡張について述べる。

キーワード：連続時間マルコフ連鎖、数値計算、待ち行列モデル

1. はじめに

待ち行列モデルの解析では、多くの場合、待ち行列長などの定常分布を導出することに焦点が当てられる。たとえば、不特定多数の人が利用する駐車場を $M/M/c/c^1$ 待ち行列としてモデル化することを考える。ここで、 c は駐車可能な最大の台数を表し、車の到着時に駐車場が満車である、すなわちすでに c 台が駐車されている場合には、この車は駐車場に入ることができずに引き返すものとする。車の平均到着率を λ ($\lambda > 0$)、平均の駐車時間を $1/\mu$ ($\mu > 0$) とすると、時刻 t ($t \geq 0$) における駐車台数 $L(t)$ は連続時間マルコフ連鎖として定式化され、その遷移速度行列 Q は次式で与えられる。

$$Q = \begin{pmatrix} -\lambda & \lambda & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \mu & -\lambda - \mu & \lambda & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 2\mu & -\lambda - 2\mu & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3\mu & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & c\mu & -c\mu \end{pmatrix}$$

このマルコフ連鎖の定常分布とは、連立一次方程式

$$\pi Q = 0, \quad \pi e = 1$$

によって一意に定まる行ベクトル π のことである。ただし、 e は要素がすべて 1 の列ベクトルを表す。

定常分布 π が、この待ち行列を特徴づけるうえで有用

であるのは以下の理由による。 $\pi_\ell(t) := \Pr(L(t) = \ell)$ を時刻 t ($t \geq 0$) において駐車されている台数が ℓ ($\ell = 0, 1, \dots, c$) である確率とし、 $\pi(t)$ を次式で定義される過渡状態確率ベクトルとする。

$$\pi(t) = (\pi_0(t), \pi_1(t), \dots, \pi_c(t)) \quad (1)$$

今の場合、遷移速度行列 Q は既約かつ正再帰的であるため、任意の初期条件 $\pi(0)$ に対して

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \pi(t) = \pi$$

が成立する。したがって、時刻 0 における初期条件 (例えば駐車場が空) の影響が消えるほどに十分長い期間が経過した後は、このシステムの状態は定常分布 π によって確率的に特徴づけられる。

上記の議論からわかるように、定常分布 π を用いたシステムの評価は、初期条件の影響が消えるほどの長期間の観測を前提としている。よって、比較的短期間におけるシステムの挙動を調べたい場合には、過渡状態確率 $\pi(t)$ ($t \geq 0$) を直接求める必要がある。

また、上記のモデルでは、車の到着率 λ が時間的に一定であるという仮定から、遷移速度行列 Q が時間的に不変である「斉時」マルコフ連鎖を考えている。もし、車の到着率を時間的に変化する関数 $\Lambda(t)$ ($t \geq 0$) として表現したい場合、このモデルは時刻に依存する遷移速度行列 $Q(t)$ をもつ「非斉時」マルコフ連鎖に拡張される。非斉時マルコフ連鎖では、ごく特殊な場合を除いて定常分布が存在せず、過渡状態確率 $\pi(t)$ ($t \geq 0$) の導出に基本的な興味がある。

本稿では、連続時間マルコフ連鎖における過渡状態

いのうえ よしあき

大阪大学大学院工学研究科

〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1

yoshiaki@comm.eng.osaka-u.ac.jp

¹ 到着間隔とサービス時間がともに指数分布に従い、かつサーバ数とシステム容量がいずれも c に等しい待ち行列モデルを示す。

確率 $\pi(t)$ ($t \geq 0$) の数値計算法に関する基本的な事項を解説する。斉時マルコフ連鎖の過渡状態確率に対する安定な数値計算法である「一様化法」について説明した後、非斉時マルコフ連鎖への一様化法の拡張に関する既存の結果を紹介する。本稿は、筆者が 2018 年 1 月に第 34 回待ち行列シンポジウムにおいて発表した「連続時間非斉時マルコフ連鎖の特別なクラスに対する一様化法」の導入部分にあたる内容となっている。非斉時マルコフ連鎖に対する数値計算法には未だ課題が残っており、シンポジウムでの発表は、その課題に対する新しいアプローチを報告したものである。本稿の最後に、この発表における問題意識を述べる。

2. 離散時間マルコフ連鎖

本稿の主題は連続時間マルコフ連鎖であるが、初めに離散時間マルコフ連鎖について触れておきたい。1 節で述べた駐車場の待ち行列は、離散時間のシステムとしてモデル化することも可能である。時間幅 τ ごとに時間軸をスロット化し、 $\{0, \tau, 2\tau, \dots\}$ という飛び飛びの時刻でのみシステムを観察する。時刻 $t = n\tau$ ($n = 0, 1, \dots$) を時刻 n と呼び、時間区間 $(n\tau, (n+1)\tau)$ を第 n スロットと呼ぶ。車の到着間隔と駐車時間の長さを「 i スロット分」($i = 1, 2, \dots$) というようにスロット単位で表現し、それらが離散確率分布（たとえば幾何分布）に従うと仮定する。加えて、技術的な仮定として、到着の発生はスロットの終端直前、退去の発生はスロットの開始直後に起こるものと仮定する²。

このような離散時間のモデルを考えた場合、時刻 n ($n = 0, 1, \dots$) における駐車台数 $\hat{L}(n)$ は離散時間マルコフ連鎖として定式化される。このマルコフ連鎖の遷移確率行列を \hat{P} とし、過渡状態確率 $\hat{\pi}_\ell(n) := \Pr(\hat{L}(n) = \ell)$ ($n = 0, 1, \dots, \ell = 0, 1, \dots$) ならびに過渡状態確率ベクトル

$$\hat{\pi}(n) := (\hat{\pi}_0(n), \hat{\pi}_1(n), \dots, \hat{\pi}_c(n))$$

を 1 節での連続時間モデルと同様に定義する。 \hat{P} の (i, j) 要素は $\Pr(\hat{L}(n) = j \mid \hat{L}(n-1) = i)$ を表すため、このシステムの時間発展は次式で表現される。

$$\hat{\pi}(n) = \hat{\pi}(n-1)\hat{P}, \quad n = 1, 2, \dots$$

すなわち、離散時間マルコフ連鎖における過渡状態確率 $\hat{\pi}(n)$ は、初期条件 $\hat{\pi}(0)$ が与えられたとき、それに \hat{P} を右から掛けていくだけで計算可能である。

さらに、遷移確率行列が時刻に依存して変化する非斉時マルコフ連鎖においても、過渡状態確率は同様に簡便な手続きで計算可能である。たとえば、上記の駐車場のモデルにおいて車の到着頻度が時刻によって変化する場合を考える。このとき、遷移確率行列は時刻 n ($n = 0, 1, \dots$) に依存して $\hat{P}(n)$ と表される。 $\hat{P}(n)$ の (i, j) 要素は $\Pr(\hat{L}(n) = j \mid \hat{L}(n-1) = i)$ を表すため、この場合も過渡状態確率ベクトルは

$$\hat{\pi}(n) = \hat{\pi}(n-1)\hat{P}(n), \quad n = 1, 2, \dots \quad (2)$$

を用いて、初期条件 $\hat{\pi}(0)$ から簡便に計算できる。

このように、離散時間マルコフ連鎖では、後述する連続時間マルコフ連鎖と比べて単純な方法で過渡状態確率を計算することができるというメリットがある。一方で、離散時間マルコフ連鎖を用いたモデル化にもデメリットが存在する。それは、モデル化の対象が元々離散時間システムである場合を除き、スロット幅 τ を適切に決定することが必ずしも容易でないことにある。対象が連続時間のシステムである場合、 τ が大きすぎると、適切な粒度で現象の時間変化を捉えることができなくなる。たとえば、駐車場の待ち行列の例では、車の到着が 1 スロットにつき高々 1 台という仮定を置いており、この仮定をもっともらしくするためには、スロット幅を十分に小さく取る必要がある。しかし一方で、スロット幅を小さく取りすぎると、(2) の漸化式を用いて過渡状態確率を求める際に必要なステップ数が増大し、非常に長い計算時間が必要になってしまう。

すなわち、現象のモデル化という観点では、元々が連続時間のシステムは連続時間マルコフ連鎖を用いてモデル化したほうが（当然だが）考えやすい。次節以降では、連続時間マルコフ連鎖における過渡状態確率の数値計算法を解説する。

3. 連続時間斉時マルコフ連鎖

3.1 準備：ポワソン過程の性質

本題に入る前に、以降の話を理解するうえで必要な、ポワソン過程の性質についてまとめておく。到着率 λ のポワソン過程を $\{N_\lambda(t); t \geq 0\}$ と表すことにする。 $N_\lambda(t)$ は時刻 $[0, t)$ に生じた到着の個数を表す確率変数であり、平均 λt のポワソン分布に従う。

$$\Pr(N_\lambda(t) = k) = \frac{\exp[-\lambda t](\lambda t)^k}{k!}, \quad k = 0, 1, \dots$$

$a_\lambda(n)$ ($n = 1, 2, \dots$) をこのポワソン過程において n 番目の到着が生じた時刻とし、 $A_\lambda(n) := a_\lambda(n) - a_\lambda(n-1)$ を到着の生起間隔とする。ただし、便宜

² これらの取り方には複数のバリエーションが存在する [1]。

上 $a_\lambda(0) = 0$ と定義する. このとき, $A_\lambda(n)$ は平均 $1/\lambda$ の指数分布に従って独立かつ同一に分布する. さらに, 微小な時間区間 $[t, t + \Delta t)$ における到着数 $\Delta N_\lambda(t) := N_\lambda(t + \Delta t) - N_\lambda(t)$ は過去の履歴とは独立に次式で特徴づけられる.

$$\begin{aligned}\Pr(\Delta N_\lambda(t) = 0) &= 1 - \lambda \Delta t + o(\Delta t) \\ \Pr(\Delta N_\lambda(t) = 1) &= \lambda \Delta t + o(\Delta t) \\ \Pr(\Delta N_\lambda(t) \geq 2) &= o(\Delta t)\end{aligned}$$

ただし, $o(\Delta t)$ は $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} o(\Delta t)/\Delta t = 0$ となる, すなわち Δt に比べて無視できるほど小さい項を表す.

次に, 到着率 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_M$ をもつ, M 種類のポワソン過程 $\{N_{\lambda_j}(t); t \geq 0\}$ ($j = 1, 2, \dots, M$) を考える. これらの重畳, すなわち確率過程

$$\{N(t); t \geq 0\} := \left\{ \sum_{j=1}^M N_{\lambda_j}(t); t \geq 0 \right\}$$

は次の性質を満たす.

- (a) $\{N(t); t \geq 0\}$ は到着率 $\lambda := \sum_{j=1}^M \lambda_j$ のポワソン過程である. すなわち, その到着間隔は平均 $1/\lambda$ の指数分布に従って独立かつ同一に分布する.
- (b) 時刻 T において $\{N(t); t \geq 0\}$ の到着が生じたとき, その到着が $\{N_{\lambda_j}(t); t \geq 0\}$ ($j = 1, 2, \dots, M$) 由来である確率は, その到着が発生するまでの間隔とは独立に λ_j/λ で与えられる.

3.2 過渡状態確率の導出

前節での準備を踏まえて, 連続時間斉時マルコフ連鎖の過渡状態確率を考察する. ここでは, 遷移速度行列 \mathbf{Q} をもつ $M+1$ 状態の連続時間斉時マルコフ連鎖を考える. 状態空間を $\mathcal{M} = \{0, 1, \dots, M\}$ と表し,

$$\mathbf{Qe} = \mathbf{0} \quad (3)$$

を仮定する³. $q_{i,j}$ を遷移速度行列 \mathbf{Q} の (i, j) 要素とし, 対角要素については $q_i := -q_{i,i}$ とおく. (3) より

$$q_i = \sum_{j \in \mathcal{M}, j \neq i} q_{i,j}, \quad i \in \mathcal{M} \quad (4)$$

が成立する. 連続時間マルコフ連鎖は, 次の規則に従った遷移を繰り返すことにより時間発展する.

- (i) 現在の状態 i ($i \in \mathcal{M}$) に, 平均 $1/q_i$ の指数分布に従う時間だけ滞在する.

- (ii) 状態 i における滞在の終了時点において, 確率 $q_{i,j}/q_i$ で状態 j ($j \in \mathcal{M}, j \neq i$) に遷移する.

前節で述べたポワソン過程の性質より, 連続時間マルコフ連鎖が従う上記の規則は, 以下の手続きを繰り返すことと等価であることがわかる.

- (i) 時刻 t_0 に状態 i へ遷移したとき, i に依存する到着率 $q_{i,j}$ をもつ M 種類のポワソン過程 $\{N_{q_{i,j}}(t); t \geq t_0\}$ ($j \in \mathcal{M}, j \neq i$) を発生させる.
- (ii) (i) で発生させた M 種類のポワソン過程の重畳で, 最初に到着が生じた時点まで時刻を進める.
- (iii) (ii) において, 最初の到着が M 種類のポワソン過程のうち j 番目のポワソン過程 $\{N_{q_{i,j}}(t); t \geq t_0\}$ から生じた場合, 状態を j に遷移させる.

すなわち, 連続時間マルコフ連鎖が状態 i ($i \in \mathcal{M}$) に滞在しているとき, 仮想的に M 種類のポワソン過程が「競走」しているとみなすことができ, この競走に勝利した (最も早く到着が生じた) ポワソン過程に対応する状態遷移が発生する. (4) ならびにポワソン過程の性質 (3.1 節) より, これら M 種類のポワソン過程の重畳は到着率 q_i のポワソン過程であり, 遷移が発生するまでの時間は平均 $1/q_i$ の指数分布に従う.

1 節の例 (式 (1)) と同様に, 過渡状態確率を並べたベクトル $\boldsymbol{\pi}(t)$ ($t \geq 0$) を定義する. 上記の議論より, 時刻 t から $t + \Delta t$ におけるシステムの時間発展は次式で表現されることがわかる.

$$\boldsymbol{\pi}(t + \Delta t) = \boldsymbol{\pi}(t)(\mathbf{I} + \mathbf{Q}\Delta t) + \mathbf{o}(\Delta t) \quad (5)$$

ただし, \mathbf{I} は単位行列を表す. 上の記述との関係を確かめるには, (5) の右辺において $\pi_i(t)$ に掛けられているのが次のベクトルであることに注目すればよい.

$$(q_{i,0}\Delta t, q_{i,1}\Delta t, \dots, q_{i,i-1}\Delta t, 1 - q_i\Delta t, q_{i,i+1}\Delta t, q_{i,i+2}\Delta t, \dots, q_{i,M}\Delta t)$$

このベクトルの第 j 要素 ($j \neq i$) である $q_{i,j}\Delta t$ は, 時間 Δt の間に j 種類目のポワソン過程から到着が生じる確率に相当する. 一方, このベクトルの第 i 要素

$$1 - q_i\Delta t = 1 - \sum_{j \in \mathcal{M}, j \neq i} q_{i,j}\Delta t$$

は, 時間 Δt の間に上記の M 種類のポワソン過程 $\{N_{q_{i,j}}(t); t \geq t_0\}$ ($j \in \mathcal{M}, j \neq i$) のいずれからも到着が生起しない確率に相当している.

- (5) より, $\boldsymbol{\pi}(t)$ に関する次の微分方程式を得る.

$$\frac{d\boldsymbol{\pi}(t)}{dt} = \boldsymbol{\pi}(t)\mathbf{Q} \quad (6)$$

³ 考えている状態空間 \mathcal{M} の外に吸収状態が存在するモデルを含めると, 一般には \mathbf{Qe} は負の値を取りうる. 本稿で紹介する数値計算法はこのような場合にも拡張可能であるが, 説明を簡単にするため $\mathbf{Qe} = \mathbf{0}$ の場合に限って話を進める.

これを解くことにより、過渡状態確率ベクトル $\pi(t)$ を初期条件 $\pi(0)$ を用いて表すことができる。

$$\pi(t) = \pi(0) \exp[\mathbf{Q}t], \quad t \geq 0 \quad (7)$$

ただし、任意の行列 \mathbf{A} に対し、行列指数関数 $\exp[\mathbf{A}]$ は次式で定義される。

$$\exp[\mathbf{A}] = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mathbf{A}^k}{k!} \quad (8)$$

3.3 過渡状態確率の数値計算

上記の議論により、このマルコフ連鎖の過渡状態確率 $\pi(t)$ を数値的に求めるには、(7) の右辺を計算すればよいことがわかる。ところが、この計算を (8) に示した行列指数関数の定義どおりに

$$\pi(t) = \pi(0) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\mathbf{Q}t)^k}{k!}, \quad t \geq 0 \quad (9)$$

を用いて行くと、すぐに問題に行き当たることになる。

例として、1 節で述べた駐車場のモデルで $c = 2$, $\lambda = 1$, $\mu = 0.5$ とし、 $t = 0$ に確率 1 でシステムが空であるときの、 $t = 20$ における過渡確率を求める問題を考える。このとき、(9) の右辺の $k = K$ までの部分 and を計算すると表 1 のような結果が得られる。紙面の都合上、 $K \leq 9$ の範囲で数値の 3 桁目まで掲載している。表 1 より、 K の増加につれて、部分和の各要素は正負を入れ替えながら急激に絶対値を増加させることがわかる。なお、部分和の絶対値は $K = 10$ 以降も増加を続け、 $K = 22$ ではすべての要素で 10^{15} を超える。最終的に求めたい $\pi(t)$ の要素は $[0, 1]$ の値であること、ならびに倍精度浮動小数点型の有効桁数は 15 桁程度であることを踏まえると、仮にもっと大きな K でこの部分 and が数値的に収束したとしても、得られた値は $\pi(t)$ の近似値としては全く信頼に値しない。

表 1 に示した異常な現象が起こる理由は次のように説明できる。遷移速度行列 \mathbf{Q} は対角要素が負、かつ非対角要素が非負であり、 $\mathbf{Q}\mathbf{e} = \mathbf{0}$ を満たしている。このとき、 \mathbf{Q} の固有値はすべて実部が 0 以下となるが、固有値の絶対値には上限が存在しない。特に、 t が小さい場合を除き、行列 $\mathbf{Q}t$ は絶対値が 1 より大きな固有値をもつため、 $(\mathbf{Q}t)^k$ は $k \rightarrow \infty$ において発散する。理論的には、 $(\mathbf{Q}t)^k$ の最終的な発散速度は $k!$ よりも小さい、すなわち、次式が成り立つことが保証される。

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{(\mathbf{Q}t)^k}{k!} = \mathbf{0}$$

しかしながら、比較的小さな k については、大きな

表 1 式 (9) の部分 and に対する数値例

K	第 0 要素	第 1 要素	第 2 要素
0	1.00e+00	0.00e+00	0.00e+00
1	-1.90e+01	2.00e+01	0.00e+00
2	2.81e+02	-4.80e+02	2.00e+02
3	-3.39e+03	7.85e+03	-4.47e+03
4	3.58e+04	-9.63e+04	6.05e+04
5	-3.29e+05	9.45e+05	-6.16e+05
6	2.62e+06	-7.74e+06	5.11e+06
7	-1.82e+07	5.43e+07	-3.61e+07
8	1.11e+08	-3.33e+08	2.22e+08
9	-6.07e+08	1.82e+09	-1.21e+09

幅で振動する $(\mathbf{Q}t)^k/k!$ を足し上げることが必要となり、表 1 のような部分 and が得られるのである。なお、 $(\mathbf{Q}t)^k/k!$ の各要素が正負いずれの値も取ることにとも注意を要する。上記の計算では巨大な正数と巨大な負数の足し算を実行する結果、桁落ち [2] によって、計算結果の精度が大きく損なわれているはずである。

このような数値計算上の問題を解決するために用いられるのが一様化法 [3] である。一様化法の基本的なアイデアは、(7) の右辺を次式で書き換えることにある。

$$\begin{aligned} \pi(t) &= \pi(0) \exp[-\theta t] \exp[(\theta \mathbf{I} + \mathbf{Q})t] \\ &= \pi(0) \exp[-\theta t] \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\theta \mathbf{I} + \mathbf{Q})^k t^k}{k!} \\ &= \pi(0) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\exp[-\theta t] (\theta t)^k}{k!} \cdot (\mathbf{I} + \theta^{-1} \mathbf{Q})^k \end{aligned}$$

ただし、 θ は正の実数である。平均 a のポワソン分布の確率質量関数を $\text{Poi}(k; a)$ ($k = 0, 1, \dots$) と表すことにすると、上式はさらに次式で書き換えられる。

$$\pi(t) = \pi(0) \sum_{k=0}^{\infty} \text{Poi}(k; \theta t) \cdot \mathbf{P}^k \quad (10)$$

ただし、 $\mathbf{P} := \mathbf{I} + \theta^{-1} \mathbf{Q}$ である。ここで、

$$\theta \geq \max_{i \in \mathcal{M}} q_i \quad (11)$$

となるように θ を十分大きく取ると、 \mathbf{P} は非負行列となり、さらに、(3) より次式が成立する。

$$\mathbf{P}\mathbf{e} = \mathbf{e}$$

すなわち、このとき \mathbf{P} は確率行列となる。以降では、 θ の値は常に (11) を満たすように選ぶものとする。

上記の導出のとおり、数学的には (9) と (10) は等価である。しかし、数値計算を行うという観点では、これらの表現式の「性質のよさ」は大きく異なっている。

a. 桁落ちの問題

(9) の右辺には正数と負数の両方が現れているため、桁落ちによって計算結果の精度が損なわれてしまう。一方で、(10) の右辺は非負数の和と積のみで構成されており、このような問題は生じない。

b. 各項の振動の問題

(9) の右辺における各項 $(Qt)^k/k!$ は、 k に関して正負を入れ替えながら振動する。前述のとおり、 t が大きいとき $(Qt)^k$ は $k \rightarrow \infty$ で発散するため、 $(Qt)^k/k!$ も、 $k \rightarrow \infty$ で $\mathbf{0}$ に収束するまでに、一時的に大きな値を取るようになる。一方で、(10) の右辺における各項 $\text{Poi}(k, \theta t) P^k$ はどの要素も常に 0 以上 1 以下の値しか取りえない。特に、 P は確率行列であるため、 P^k は $k \rightarrow \infty$ において確率行列に収束することが保証される。

c. 無限和の打ち切り誤差の問題

(9) と (10) の右辺はいずれも無限和を含んでおり、これらを数値計算する際には有限和で打ち切って近似する必要がある。(9) の右辺の無限和については、打ち切り誤差の評価が容易ではない。一方、(10) の右辺の打ち切り誤差については単純な上界を得ることができる。具体的には、打ち切り点を $k = K$ とすると、残余項は

$$\pi(0) \sum_{k=K+1}^{\infty} \text{Poi}(k; \theta t) \cdot P^k$$

となるが、 $\pi(0) P^k \mathbf{e} = 1$ に注意すると、上式の各要素はポワソン分布の裾確率 $\sum_{k=K+1}^{\infty} \text{Poi}(k; \theta t) = 1 - \sum_{k=0}^K \text{Poi}(k; \theta t)$ で上から押さええられる。

このように、一様化による変形 (10) は数値計算を行ううえで非常にメリットが大きい。

3.4 一様化法の確率的解釈

前節では、一様化で用いる公式 (10) を式変形によって導出した。ここでは、連続時間マルコフ連鎖の性質をもとに、(10) が成り立つ理由を直観的に説明する。

3.2 節で述べたように、連続時間マルコフ連鎖が状態 i ($i \in \mathcal{M}$) に滞在しているとき、仮想的に M 種類のポワソン過程 $\{N_{q_{i,j}}(t); t \geq t_0\}$ ($j \in \mathcal{M}, j \neq i$) が競走しているものとみなすことができ、次の状態遷移が発生する時点は、これらを重畳した到着率 q_i のポワソン過程によって支配される。そこで、時間区間 $[0, t)$ においてマルコフ連鎖の状態遷移が発生した回数 $N(t)$ に注目する。確率過程 $\{N(t); t \geq 0\}$ は、マルコフ連鎖が状態 i ($i \in \mathcal{M}$) に滞在中であるとき到着率 q_i のポワソン過程に従うため、これは到着率が時間的に変

化するポワソン過程である。

状態 i ($i \in \mathcal{M}$) での滞在時に、上記の M 種類のポワソン過程に加えて、同じ状態 i に留まる遷移を引き起こす、到着率 $\gamma_i > 0$ のポワソン過程 $\{N_{\gamma_i}(t); t \geq 0\}$ を競走に参加させることを考える。 $\{N_{\gamma_i}(t); t \geq 0\}$ が競走に勝利した場合は、元と同じ状態 i へ遷移するため、 γ_i の値にかかわらず、このようなポワソン過程を追加しても過渡状態確率そのものは変わらない。そこで、(11) を満たす θ に対して、 γ_i を次式で定める。

$$\gamma_i = \theta - q_i \quad i \in \mathcal{M} \quad (12)$$

このとき、(4) より、競走に参加するポワソン過程の到着率の和が、 $i \in \mathcal{M}$ によらず常に θ と等しくなる。

$$\theta = \gamma_i + \sum_{j \in \mathcal{M}, j \neq i} q_{i,j}$$

すなわち、元の連続時間マルコフ連鎖に対し、同一状態への到着率 γ_i の遷移を加えた新しい確率過程では、状態遷移の発生は一定の到着率 θ をもつポワソン過程 $\{N_{\theta}(t); t \geq 0\}$ をなす。さらに、この新しい確率過程は状態遷移時点において $q_{i,j}/\theta$ で状態 j ($j \in \mathcal{M}, j \neq i$) に遷移し、確率 $1 - (q_i/\theta)$ で同じ状態 i に留まるため、その状態遷移は遷移確率行列 $\mathbf{I} + \theta^{-1} \mathbf{Q}$ に従う。

よって、時刻 t までに発生した状態遷移数 $N_{\theta}(t)$ で場合分けすることにより、この確率過程の時刻 $[0, t)$ における状態遷移は次式の遷移確率行列で表される。

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} \Pr(N_{\theta}(t) = k) (\mathbf{I} + \theta^{-1} \mathbf{Q})^k \\ = \sum_{k=0}^{\infty} \text{Poi}(k; \theta t) P^k \end{aligned} \quad (13)$$

前述のとおり、この確率過程の過渡状態確率は元の連続時間マルコフ連鎖と等しいため、(13) は元の連続時間マルコフ連鎖において (10) が成立することを意味する。

以上の議論からわかるように、連続時間マルコフ連鎖の一様化とは、状態遷移の発生が時間的に同質なポワソン過程となるように、状態 i ($i \in \mathcal{M}$) から同じ状態 i への遷移を付け加える操作にほかならない。

4. 連続時間非斉時マルコフ連鎖

4.1 過渡状態確率の導出

本節では、遷移速度行列が時刻に依存して変化する場合を考える。状態空間 $\mathcal{M} = \{0, 1, \dots, M\}$ は前節と同様に時間に関して不変であるとする。時刻 t にお

ける遷移速度行列を $Q(t)$ と表し、次式を仮定する。

$$Q(t)e = 0 \quad (14)$$

$q_{i,j}(t)$ を遷移速度行列 $Q(t)$ の (i, j) 要素とし, $q_i(t) := -q_{i,i}(t)$ とおく. (14) より, 次式が成立する.

$$q_i(t) = \sum_{j \in \mathcal{M}, j \neq i} q_{i,j}(t), \quad i \in \mathcal{M}$$

以降では, 状態遷移率が有界であることを仮定する.

$$q_{\text{sup}} := \sup\{q_i(t); t \geq 0, i \in \mathcal{M}\} < \infty$$

連続時間非斉時マルコフ連鎖の挙動は, 時刻に依存する到着率をもつポワソン過程, すなわち非斉時ポワソン過程を用いて記述できる. 時刻 t における到着率が $\Lambda(t)$ で与えられる非斉時ポワソン過程を $\{\tilde{N}_\Lambda(t); t \geq 0\}$ と表すことにする. 3.1 節で述べた斉時ポワソン過程と同様に, 微小な時間区間 $[t, t + \Delta t)$ における $\{\tilde{N}_\Lambda(t); t \geq 0\}$ の到着数 $\Delta\tilde{N}_\Lambda(t) := \tilde{N}_\Lambda(t + \Delta t) - \tilde{N}_\Lambda(t)$ は, 過去の履歴とは独立に次式で特徴づけられる.

$$\begin{aligned} \Pr(\Delta\tilde{N}_\Lambda(t) = 0) &= 1 - \Lambda(t)\Delta t + o(\Delta t) \\ \Pr(\Delta\tilde{N}_\Lambda(t) = 1) &= \Lambda(t)\Delta t + o(\Delta t) \\ \Pr(\Delta\tilde{N}_\Lambda(t) \geq 2) &= o(\Delta t) \end{aligned}$$

連続時間非斉時マルコフ連鎖の時間発展は, 次の手続きの繰り返しとして記述することができる.

- (i) 時刻 t_0 に状態 i へ遷移したとき, i に依存する到着率 $q_{i,j}(t)$ をもつ M 種類の非斉時ポワソン過程 $\{\tilde{N}_{q_{i,j}}(t); t \geq t_0\}$ ($j \in \mathcal{M}, j \neq i$) を発生させる.
- (ii) (i) で発生させた M 種類の非斉時ポワソン過程の重畳で, 最初の到着の生起時点まで時刻を進める.
- (iii) (ii) において, 最初の到着が M 種類の非斉時ポワソン過程のうち j 番目の非斉時ポワソン過程 $\{\tilde{N}_{q_{i,j}}(t); t \geq t_0\}$ から生起した場合, 状態を j に遷移させる.

すなわち, 連続時間非斉時マルコフ連鎖が状態 i ($i \in \mathcal{M}$) に滞在しているとき, 仮想的に M 種類の非斉時ポワソン過程が競走しているとみなすことができ, この競走に勝利した非斉時ポワソン過程に対応する状態遷移が次に発生する.

したがって, (5) と同様に過渡状態確率 $\pi(t)$ は

$$\pi(t + \Delta t) = \pi(t)(I + Q(t)\Delta t) + o(\Delta t)$$

を満たし, この式から次の微分方程式が得られる.

$$\frac{d\pi(t)}{dt} = \pi(t)Q(t), \quad t \geq 0 \quad (15)$$

(15) の解は斉時マルコフ連鎖の場合と比べて複雑な形を取り, 次式の無限級数によって与えられる.

$$\pi(t) = \pi(0) \sum_{k=0}^{\infty} \int_{u_1=0}^t \int_{u_2=u_1}^t \cdots \int_{u_k=u_{k-1}}^t Q(u_1)Q(u_2) \cdots Q(u_k) du_k du_{k-1} \cdots du_1 \quad (16)$$

以上より, 連続時間非斉時マルコフ連鎖における過渡状態確率の数値計算は, (16) の右辺をどのように数値的に評価するかという問題に帰着される.

4.2 過渡状態確率の数値計算 [4-6]

最後に, 一様化法の連続時間非斉時マルコフ連鎖への拡張に関して文献 [4-6] で報告されている結果の概略を紹介する. 文献 [4] ならびに [5] のアプローチでは, (16) が次式で書き換えられることを利用する.

$$\pi(t) = \pi(0) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\exp[-\theta t](\theta t)^k}{k!} \cdot P_k(t) \quad (17)$$

ただし, θ は非負の実数であり,

$$P(t) := I + \theta^{-1}Q(t)$$

を用いて, $P_k(t)$ は $P_0(t) = I$ および

$$\begin{aligned} P_k(t) &= \int_{u_k=0}^t \int_{u_{k-1}=0}^{u_k} \cdots \int_{u_1=0}^{u_2} \\ &P(u_1)P(u_2) \cdots P(u_k) \\ &\cdot \frac{k!}{t^k} du_1 du_2 \cdots du_k, \quad k = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (18)$$

で与えられる. 定義より, $\theta \geq q_{\text{sup}}$ を満たすように θ を定めると, $P(t)$ および $P_k(t)$ は確率行列となる.

(17) は, 3.4 節での議論と同様の方法で解釈できる. すなわち, $i \in \mathcal{M}$ に対して $\gamma_i(t)$ を

$$\gamma_i(t) := \theta - q_i(t), \quad t \geq 0$$

と定義し, 到着率 $\gamma_i(t)$ の非斉時ポワソン過程に従う, 状態 i から同じ状態 i への遷移を加えた新しい確率過程を考えればよい. このとき, 状態遷移の発生は 3.4 節のときと同様に到着率 θ の斉時ポワソン過程 $\{N_\theta(t); t \geq 0\}$ をなす. この新しい確率過程では, 時刻 t に状態 i からの遷移が起こったとき, 確率 $q_{i,j}(t)/\theta$ で状態 j ($j \in \mathcal{M}, j \neq i$) へ遷移し, 確率 $q_i(t)/\theta$ で状態 i に留まるため, 状態遷移は時刻に依存する遷移確率行列 $I + \theta^{-1}Q(t)$ に従う. ポワソン過程では, 時間区間 $[0, t)$ に生起した到着数が k であるという条件のもとで, 各到着の生起時刻は独立に一様分布 $[0, t)$ に従い, その結合確率密度関数は $k!/t^k$ で与えられる.

よって、定義 (18) より、 $\mathbf{P}_k(t)$ は、状態遷移の発生回数を k で条件付けたもとの遷移確率行列を表す。

文献 [4] ならびに [5] では、時間軸の離散化によって (18) の右辺を計算する手法が提案されている。すなわち、時間区間 $[0, t)$ を幅 τ ごとに分割し、その n 番目 ($n = 0, 1, \dots, (t/\tau) - 1$) の区間 $[n\tau, (n+1)\tau)$ における遷移確率行列 $\mathbf{P}(t)$ を定数行列 $\hat{\mathbf{P}}(n)$ により近似することで、(18) の右辺の積分を有限項の和として求める方法が考察されている。文献 [4] では離散化を素朴な区分求積法に基づいて行っているが、文献 [5] では、同じ離散化区間 $[n\tau, (n+1)\tau)$ に入るポワソン到着の数に応じた補正係数を掛けることで計算精度が向上することが示されている。

一方、文献 [6] では、これらとは異なるアプローチによる一様化法の拡張が行われている。文献 [6] の基本的なアイデアは、遷移確率行列 $\mathbf{Q}(t)$ を

$$\mathbf{Q}(t) = \sum_{r=1}^R \Lambda^{(r)}(t) \mathbf{Q}^{(r)}, \quad t \geq 0 \quad (19)$$

と表現することにある。ただし、 $\mathbf{Q}^{(r)}$ は時刻 t に依存しない遷移速度行列であり、 $\Lambda^{(r)}(t)$ は非負関数である。状態空間は有限であるという仮定から、任意の遷移速度行列 $\mathbf{Q}(t)$ は上式の形で書き換えられる。

(19) は、連続時間非斉時マルコフ連鎖の状態遷移を、 R 種類の非斉時ポワソン過程の重畳として表している。到着率 $\Lambda_1(t), \Lambda_2(t), \dots, \Lambda_M(t)$ をもつ、 M 種類の非斉時ポワソン過程 $\{\tilde{N}_{\Lambda_j}(t); t \geq 0\}$ の重畳

$$\{N(t); t \geq 0\} := \left\{ \sum_{j=1}^M \tilde{N}_{\Lambda_j}(t); t \geq 0 \right\}$$

を考えると、斉時ポワソン過程 (3.1 節) の場合と同様に、次のことが成り立つ [6]。

- (a) $\{N(t); t \geq 0\}$ は到着率 $\Lambda(t) := \sum_{j=1}^M \Lambda_j(t)$ の非斉時ポワソン過程である。
- (b) 時刻 T において $\{N(t); t \geq 0\}$ の到着が生じたとき、その到着が $\{\tilde{N}_{\Lambda_j}(t); t \geq 0\}$ ($j = 1, 2, \dots, M$) 由来である確率は、到着が発生するまでの間隔とは独立に $\Lambda_j(T)/\Lambda(T)$ で与えられる。

これを踏まえて、文献 [6] では、(19) で表現される連続時間非斉時マルコフ連鎖における状態遷移の発生が到着率 $\Lambda(t) := \sum_{r=1}^R \Lambda^{(r)}(t)$ の非斉時ポワソン過程 $\{\tilde{N}_{\Lambda}(t); t \geq 0\}$ に従い、かつ、時刻 t ($t \geq 0$) における状態遷移が確率 $\Lambda^{(r)}(t)/\Lambda(t)$ で遷移確率行列 $\mathbf{Q}^{(r)}$ に従うことに注目した数値計算法を構築している。すなわち、文献 [4, 5] とは異なり、非斉時ポワソン過程

を用いた一様化法の拡張が提案されている。

計算の基本的な手順は次のとおりである。時間区間 $[0, t)$ を幅 τ ごとに分割し、その n 番目 ($n = 0, 1, \dots, (t/\tau) - 1$) の区間 $[n\tau, (n+1)\tau)$ における状態遷移の発生数 $\Delta \hat{N}(n) := \tilde{N}_{\Lambda}((n+1)\tau) - \tilde{N}_{\Lambda}(n\tau)$ の確率質量関数を次式により厳密に評価する。

$$\Pr(\Delta \hat{N}(n) = k) = \frac{\exp[-\bar{\Lambda}(n)] (\bar{\Lambda}(n))^k}{k!}$$

ただし、 $\bar{\Lambda}(n)$ は次式で定義される。

$$\bar{\Lambda}(n) := \int_{n\tau}^{(n+1)\tau} \Lambda(u) du, \quad t \geq 0$$

さらに、その区間における選択確率 $\Lambda^{(r)}(t)/\Lambda(t)$ を定数で近似することで、過渡状態確率を計算する。

文献 [6] では、この方法をベースにした複数の数値計算アルゴリズムが提案されている。

5. おわりに

本稿では、連続時間マルコフ連鎖における過渡状態確率の数値計算法を紹介した。連続時間斉時マルコフ連鎖においては、一様化法を用いることにより過渡状態確率を安定的に計算可能であることを述べた。また、一様化法の連続時間非斉時マルコフ連鎖への拡張として、文献 [4-6] の結果を紹介した。1 節で述べたように、連続時間非斉時マルコフ連鎖に対する数値計算法には未だ課題が残っていると筆者は考えている。それは、文献 [4-6] で提案されている手法のいずれも、時間軸をスロット化する離散化の操作を前提としていることにある。これは、「与えられた連続時間マルコフ連鎖の過渡状態確率を計算する」手法としては確かに有用である。しかし、2 節で述べたように、現実のシステムをモデル化するという立場では、そもそも時間軸のスロット化を前提とするならば、初めから離散時間非斉時マルコフ連鎖としてモデル化を行うのが自然であるし、過渡状態確率の数値計算も容易である。

筆者の第 34 回待ち行列シンポジウムにおける発表では、連続時間非斉時マルコフ連鎖の特別なクラスを対象を限定することで、時間軸の離散化を要さない方法で (18) の右辺の積分が離散的な和に書き換えられることを示した。この内容に基づく新しい数値計算法の構築に向けて、現在も引き続き研究を行っている。

参考文献

- [1] H. Takagi, *Queueing Analysis Vol. 3: Discrete-Time Systems*, North-Holland, 1993.
- [2] 伊理正夫, 藤野和建, 『数値計算の常識』, 共立出版, 1985.

- [3] H. C. Tijms, *Stochastic Models, An Algorithmic Approach*, Wiley, 1994.
- [4] N. M. van Dijk, “Uniformization for nonhomogeneous Markov chains,” *Operations Research Letters*, **12**, pp. 283–291, 1992.
- [5] A. P. A. van Moorsel and K. Wolter, “Numerical solution of non-homogeneous Markov processes through uniformization,” In *Proceedings of the 12th European Simulation Multiconference*, pp. 710–717, 1998.
- [6] M. Arns, P. Buchholz and A. Panchenko, “On the numerical analysis of Inhomogeneous continuous-time Markov chains,” *INFORMS Journal on Computing*, **22**, pp. 416–432, 2010.