

2023 年臺灣國際科學展覽會 優勝作品專輯

作品編號 010014

參展科別 數學

作品名稱 臺灣各縣市感染相對比率的馬可夫鍊探討

得獎獎項

就讀學校 國立臺灣師範大學附屬高級中學

指導教師 陳鵬旭、王紹宣

作者姓名 楊祐傑

關鍵詞 轉移矩陣、矩陣級數收斂、期望值與變異數

作者簡介



我是楊祐傑，目前就讀師大附中 1535 科學班。我喜歡數學、彈鋼琴、看漫畫、打羽球。高中做科展的時間總是一眨眼就過了，原本只打算多做一點進度，一不小心就在學校多待了好幾個小時。在研究的途中，常常會遇到困難、理不清思緒，需要蒐集資料、請教同學與老師，最後才能完全弄懂。雖然遭遇許多挫折，但解開問題、證明完畢的瞬間帶給我極大的滿足感，也讓我更加喜歡上數學。

摘要

本研究主要探討一群帶原者在城市間的隨機移動。假設城市總共是有限多個、每次移動只跟當前城市有關，與總移動次數、移動到當前城市的過程無關。本研究假設每次移動時間為一天。在上述條件下，我去思索帶原者是否必定會到達特定的都市。此時加入了任意城市均與此特定都市連通的條件。

關於數學推導的部分，先證明當移動次數趨近無限大時，帶原者到達首都的機率趨近於1。再來由轉移矩陣具穩定狀態的性質，證明期望值與變異數的收斂。最後，利用矩陣的極限與隨機變數兩種方式，解得期望值與變異數的關係式，將極限問題轉換成解線性方程式。

在模型實作方面，我收集了 CDC 五月的資料，並經過平均、換成感染相對比率後形成機率矩陣。運用拉格朗日參數法求最小值條件後，藉由大量的隨機撒點以牛頓法迭代求得最適轉移矩陣，以評估疫情變化。並利用自助抽樣法求得6月感染相對比率的95%信賴區間，繪圖進行比較。

Abstract

The random movement of a group of infected people between cities is mainly discussed in this study. We assume that there are a finite number of cities in total, and each movement is only correlated to the city where the people are located, and not to the total numbers of moves and the process of moving to that city. This study assumes that the time for each movement is one-day. Under the above assumptions, we are going to find whether or not these infected people will definitely reach the specific city, and we suppose that any city is connected to the specific city.

For the mathematical part, first I prove that when the number of moves approaches infinity, the probability of infected people reaching the capital approaches 1. Then, the convergence of the expected value and the variance is proved by the steady state theorem of the transition matrix. Finally, by using the limit of the matrix or random variables, the relationship between the expected value and the variance is

found. This relationship has the limit problem converted into finding a solution of system of linear equations.

Regarding the model implementation, the data in May, 2022 from the CDC was collected, and a probability matrix was formed by averaging and replacing it with the relative infection rate. Thereafter, I use the Lagrange multiplier method to find the equations that the minimum must follow. Then the large number of random points and Newton method is used to iteratively obtain the optimal transition matrix. Thus, we can evaluate the change of the epidemic. I use the Bootstrap Method to obtain the 95% confidence interval of the relative rate of infection in June, and draw for comparison.

壹、前言

一、研究動機

近年來，新冠肺炎疫情肆虐，世界各地不斷傳出帶原者增加的消息。在這樣的時空背景下，我們擔心帶原者何時會到來我們所在城市，造成感染的風險。因此，我想探討帶原者在不同城市間移動的問題。為此，我嘗試以一階馬可夫鍊的模型，以預估帶原者的移動。

首先令我好奇的是，如果現在疫情是發生在距離我們十分遙遠的城市，可能只有幾兆分之一的機率移動過來我們國家。這麼一來，當帶原者沒有復原，不斷移動後，到達我們國家的機率會不會也很小呢，還是不論如何都一定會過來？這是我所提出的第一個問題。

接下來，如果不論如何一定會到來，我想去了解帶原者平均經過多久會到來。假設帶原者每天移動 m 次，先去計算移動天數的期望值與變異數是否會發散到無窮大，這樣就無法算出一個定值。如果期望值與變異數收斂至非無窮大，則嘗試找出期望值與變異數的計算方式。

最後，計算完期望值、變異數的公式後，我想藉由台灣各縣市感染人數的數據，利用數值算法求出轉移後誤差最小的矩陣（最適矩陣），並結合前面所推導的結果計算，用以評估疫情的變化，並測試此模型、數值算法是否能擬合真實情況。

二、研究目的

- （一）證明當移動次數趨近於無限大時，到任意選定特定城市 n 的機率趨近於1。
- （二）證明帶原者移動次數的期望值、變異數必定收斂，非發散至無窮大。
- （三）選頂特定城市 n 、每次移動的固定機率下，找出不同初始位置期望值、變異數的關係。
- （四）以實際每日感染數據擬合，設計程式找出最適轉移矩陣，求出每座城市的期望值與變異數。

三、文獻回顧

- （一）馬可夫鍊在 COVID-19 應用

在閱讀過去應用馬可夫鍊來進行 COVID-19 疫情的預測時，我發現大多研究皆以居民的健康情形做為狀態空間，例如正常、感染以及死亡等狀態。

以下以兩篇論文為例說明其馬可夫鍊的假設，以及其求得轉移矩陣後進行之數據處理。

1. A Markov Chain Model for Covid-19 Survival Analysis

此篇文章採用左轉移矩陣，各列機率和為1。並取用一天當作轉移的單位時間。

先以只有三個狀態(未感染、感染、住院)舉例說明，當感染機率、停留在住院狀態機率較小時，稱為效率系統(efficient system)，不然為無效率系統(inefficient system)。也提到穩定狀態機率的倒數可被解釋成連續兩次進入此狀態的平均時間。在效率系統中穩定狀態感染、住院比例較低，連續住院時間也較長。

在更複雜的模型中則分成未感染、感染(居家隔離)、住院、加護病房以及死亡等五個狀態，由於死亡為吸收狀態，因此先將轉移矩陣 P 對應死亡狀態的列與行刪除到子矩陣 Q ，再計算 $(I - Q)^{-1}$ ，其中 I 為單位方陣。那麼 $(I - Q)^{-1}$ 的第 i 列第 j 行元素 r_{ij} 即為從狀態 i 轉移至狀態 j 平均日數。文章中將平均日數加起來得到未感染到加護病房平均時間。並計算矩陣乘法求得16天內成為感染的機率。最後給出了從狀態 i 開始，死亡前遇到狀態 j 的機率 f_{ij} 。

在數學方面，其提及穩定狀態可藉由高次方矩陣乘法求得，或解線性方程式。

也說明 f_{ij} 的求法為 $f_{jj} = 1 - \frac{1}{r_{jj}}$ 、 $f_{ij} = \frac{r_{ij}}{r_{jj}}$ ($i \neq j$)。

2. The hidden Markov chain modelling of the COVID-19 spreading using Moroccan dataset

此篇文章中將居民的狀態分為健康、感染、死亡與復原四種，其中假設死亡和復原為吸收狀態，以圖片表示轉移過程而非矩陣形式。並進行2020年3月到6月摩洛哥預測人數與實際觀測人數的繪圖。

針對每一天的數據，作者去計算新確診率 RR (新病例數除以累計病例數)、總復原率 RC (累計復原人數除以累計病例數)、死亡率 RD (累計死亡人數除以累計病例數) 以及活性病患比率 RA ((累計病例 - 復原人數) / 累計病例數)。再去計算120

天的平均 $A_{RR}, A_{RC}, A_{RD}, A_{RA}$ 作為馬可夫鍊轉移機率。並以矩陣乘法進行預測。最後進行10000次模擬繪出95%信賴區間作圖。

(二) 函數極小值的求法

關於限制條件下多變數函數極小值的求法，較常用的有拉格朗日乘數法以及 KKT 條件，以下資料主要參考自線代啟示錄。

1. 拉格朗日乘數法

欲求一次可微 n 變數函數 $f(x_1, \dots, x_n)$ 在 m 個限制條件

$g_1(x_1, \dots, x_n), \dots, g_m(x_1, \dots, x_n) = 0$ 的極小值，改令 $n + m$ 變數函數

$L(x_1, \dots, x_n, \alpha_1, \dots, \alpha_m) = f - \sum_{i=1}^m \alpha_i g_i \circ (x_1, \dots, x_n)$ 為極小值的必要條件，為存在

一組 $(\alpha_1, \dots, \alpha_m)$ 使得 $\frac{\partial L}{\partial x_1} = \dots = \frac{\partial L}{\partial x_n} = \frac{\partial L}{\partial \alpha_1} = \dots = \frac{\partial L}{\partial \alpha_m} = 0$ 。因此常常直接解方程

式，再決定何謂最小值。

2. Karush-Kuhn-Tucker (KKT) 條件

推廣拉格朗日乘數法，從等式限制到不等式限制極為 KKT 條件。欲求一次可微 n 變數函數 $f(x_1, \dots, x_n)$ 在 m 個等式限制 $g_1(x_1, \dots, x_n), \dots, g_m(x_1, \dots, x_n) = 0$ 、 p 個不等式限制 $h_1(x_1, \dots, x_n), \dots, h_p(x_1, \dots, x_n) \leq 0$ 的極小值，改定義 $n + m + p$ 變數函數

$L(x_1, \dots, x_n, \alpha_1, \dots, \alpha_m, \beta_1, \dots, \beta_p) = f + \sum_{i=1}^m \alpha_i g_i + \sum_{i=1}^p \beta_i h_i \circ (x_1, \dots, x_n)$ 為極小值

的必要條件，為存在一組 $(\alpha_1, \dots, \alpha_m, \beta_1, \dots, \beta_p)$ 使得 $\frac{\partial L}{\partial x_1} = \dots = \frac{\partial L}{\partial x_n} = \frac{\partial L}{\partial \alpha_1} = \dots =$

$\frac{\partial L}{\partial \alpha_m} = \beta_1 h_1 = \dots = \beta_p h_p = 0$ ，並且同時滿足 $h_1, \dots, h_p \leq 0$ 、 $\beta_1, \dots, \beta_p \geq 0$ 。因此常

常直接解方程式，再決定何謂最小值。

3. 牛頓－拉福生法

設 $F : D \rightarrow R^n$ 為可微向量函數，其中 $D \subseteq R^n$ ， $F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{bmatrix}$ 。欲解 $F(x) = 0$ ，

可藉由迭代方式求解。先選定初始值 x_0 ，再由遞迴式 $x_{k+1} = x_k - J(x_k)^{-1}F(x_k)$ 求

解。其中 $J(x_k)$ 為 Jacobian 矩陣 $J(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix}$ 。

4. 矩陣跡數(trace)的微分

(1) 設 $f: \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}$ 為矩陣函數，若 f 對於每一個變數皆可微分，則定義其微分

$$\frac{\partial}{\partial X} f(X) = \left[\frac{\partial}{\partial x_{ij}} f(X) \right]_{m \times n}。$$

(2) $n \times n$ 矩陣 $M = [m_{ij}]$ 的矩陣跡數為 $\text{tr}(M) = \sum_{i=1}^n m_{ii}$ 。

(3) 跡數微分性質1： $\frac{\partial}{\partial X} [\text{tr}(AX)] = A^T$

(4) 跡數微分性質2： $\frac{\partial}{\partial X} [\text{tr}(XAX^T)] = X(A + A^T)$

5. 程式執行 PLU 分解

於 Numerical Recipes in C 一書第44~48頁中，提供了進行 PLU 分解的程式執行，由於浮點數運算有捨進誤差，進行第 j 行的消去時，會先挑選第 j 列到第 n 列中絕對值最大的元，進行列交換使其成為軸元再進行消去。

(三) 自助抽樣法(Bootstrap method)

在獲得一組樣本數據 x_1, x_2, \dots, x_n 後，我們將其視為由服從分佈函數 F 的母體進行隨機抽樣的結果。藉由這 n 筆數據計算出了一個估計 $\hat{\theta}$ ，其為隨機變數 X_1, X_2, \dots, X_n 的函數，其樣本分佈是一個只與 n, F 有關的機率分佈。當遇到 F 未知或是計算 $\hat{\theta}$ 十分複雜時，會出現無法得知 $\hat{\theta}$ 分佈的情形。此時，自助抽樣法可以有效地進行 $\hat{\theta}$ 分佈的估計，方法有以下四步。

1. **建立經驗分佈**：給予 x_1, x_2, \dots, x_n 每個樣本皆為 $\frac{1}{n}$ 機率，此為經驗分佈函數 F_n ，作為對於整體分佈 F 的估計
2. **重新抽樣**：由經驗分佈函數 F_n 重新進行 n 次的可重複隨機抽樣，此為重採樣(resample)

3. **計算統計資料**：針對此重新抽樣的數據，計算我們感興趣的統計資料 T_n ，得到 T_n^* 。
4. **重複抽樣**：設立一個很大的重複次數 B ，重複2,3步驟 B 次，獲得 B 次重抽樣。 B 的大小取決於所進行的測試，通常以1000次去計算信賴區間。
5. **獲得 T_n 的分佈**：給予每個 T_n^* ，即 $T_n^{*1}, T_n^{*2}, T_n^{*3}, \dots, T_n^{*B}$ 相同的機率 $1/B$ ，此為自助抽樣法對於 T_n 分佈估計。並可藉由此樣本分佈得到由 T_n 推論的 θ 。

(四) 矩陣的無窮級數

有關於矩陣計算極限與無窮級數，在 A Matrix Handbook for Statisticians 的第19章有十分詳細的定義與相關定理，以下挑重點提出

1. **矩陣收斂定義**：設 $m \times n$ 矩陣序列 $\langle A^{(k)} \rangle$ ，其中 $A^{(k)} = [a_{ij}^{(k)}]$ ， $k = 1, 2, \dots$ 。 $\langle A^{(k)} \rangle$ 收斂於 $m \times n$ 矩陣 A 若且唯若 $\langle A^{(k)} \rangle$ 的每一項都收斂於 A 對應位置的項。記為 $\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)} = A = [a_{ij}]_{m \times n}$ 。即 $\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)} = A \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} a_{ij}^{(k)} = a_{ij}, \forall i, j \in \mathbb{N}, 1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq n$ 。
2. **矩陣級數定義**：設 $m \times n$ 矩陣序列 $\langle A^{(k)} \rangle$ ，其中 $A^{(k)} = [a_{ij}^{(k)}]$ ， $k = 1, 2, \dots$ 。定義序列 $\langle S^{(n)} \rangle$ 為 $S^{(k)} = \sum_{i=0}^k A^{(i)}$ 。若 $\langle S^{(n)} \rangle$ 收斂於 S 則稱級數 $\sum_{k=0}^{\infty} A^{(k)}$ 收斂於 S 。記為 $\sum_{k=0}^{\infty} A^{(k)} = S$ 。
3. **定理0.1 冪級數收斂判斷**：設 A 為方陣， $\rho(A)$ 為其譜半徑（ A 特徵根絕對值的最大值）。若冪級數 $\sum_{i=0}^{\infty} |a_i| \rho(A)^i$ 收斂，則 $\sum_{i=0}^{\infty} a_i A^i$ 收斂。

(五) 轉移矩陣

於「『轉移矩陣』兩三事：高中課本中穩定狀態的求法」文章中，作者比較了各種舊課綱教科書（非108課綱）中穩定狀態的描述，本報告預計使用下列定義。同時，文章中也提到轉移矩陣擁有穩定狀態的充要條件

1. **穩定狀態定義**：令 A 為 $n \times n$ 的轉移矩陣，若對任意 $n \times 1$ 、元素和為1的機率矩

陣 B 皆有固定且唯一的 $n \times 1$ 機率矩陣 C 使得 $\lim_{n \rightarrow \infty} (A^n B) = C$ ，則稱 C 為轉移矩陣 A 的穩定狀態。

2. 定理0.2 穩定狀態判別定理：轉移矩陣 A 有穩定狀態 $\Leftrightarrow A$ 的特徵根1為單根且其他根絕對值小於1。

貳、研究方法或過程

一、研究問題

(二) 帶原者隨機移動描述

1. 現在有一整群的帶原者，在 $n + 1$ 個城市中移動，其中 n 為正整數。將城市標號為 $0, 1, 2, \dots, n$ ，帶原者的位置即為所在城市的編號。任意城市皆與特定城市 n 連通。
2. 每次移動都有機率讓位置改變，但仍舊介於 $0, 1, 2, \dots, n$ 之間。
3. 移動到其他位置的機率，只跟所在位置有關，與目前總移動次數、移動到當前位置的過程無關。即帶原者位置為馬可夫鍊。
4. 為了評估帶原者最快到達時間，當位置到達 n (特定城市)則不再進行移動。

(三) 相關名詞

1. 定義1.1 初始位置：尚未進行任何移動時所在位置。
2. 定義1.2 特定都市：標號為 n 的城市，帶原者到此不再進行移動。
3. 定義1.3 帶原者移動次數期望值：令 p_i 為帶原者移動 i 後恰到達城市 n 的機率，若 $\sum_{i=1}^{\infty} (i \times p_i)$ 存在，則稱 $\sum_{i=1}^{\infty} (i \times p_i)$ 為帶原者移動次數期望值，簡稱為期望值。(為便於運算，有時也視為 1×1 矩陣)
4. 定義1.4 帶原者移動次數變異數：令 p_i 為帶原者移動 i 後恰到達城市 n 的機率，若期望值 $E = \sum_{i=1}^{\infty} (i \times p_i)$ 存在，且 $\sum_{i=1}^{\infty} p_i \times (i - \sum_{i=1}^{\infty} (i \times p_i))^2$ 存在，則稱 $\sum_{i=1}^{\infty} p_i \times (i - E)^2$ 為帶原者移動次數變異數，簡稱為變異數。(為便於運算，

有時也視為 1×1 矩陣)

5. **定義1.5** 城市 j 與城市 n (特定都市)連通：令 X_i 為帶原者移動 i 次後的所在城市的隨機變數， $i = 0, 1, \dots, n$ ，城市 j 與城市 n 連通若且唯若存在正整數 N 使得 $P(X_N = n | X_0 = i) > 0$ 。

二、**定理2.1** 當移動次數趨近於無限大時，到特定都市的機率趨近於1。

令帶原者移動 q 次後到達位置 r 的機率為 $p_r^{(q)}$ ，其中 $0 \leq r \leq n, 0 \leq q$ ，移動 q 次後的機率矩陣 $P^{(q)}_{(n+1) \times 1} = [p_{i1}^{(q)}]$ 。因為每次移動機率只跟位置有關，可令對應的轉移矩陣為 $A_{(n+1) \times (n+1)} = [a_{ij}]$ ，即 $P^{(q+1)} = AP^{(q)}, \forall q \geq 0$ 。雖然帶原者移動到城市 n 時不再進行移動、也不再計算所移動的次數，但在這邊的轉移矩陣我們還是讓城市 n 進行移動到城市 n ，故 $a_{(n+1)(n+1)} = 1$ 且 $a_{i(n+1)} = 0, \forall n \geq i \geq 0$ 。意即可將 A 寫成 $A = \begin{bmatrix} Q_{n \times n} & O_{n \times 1} \\ R_{1 \times n} & 1 \end{bmatrix}$ 。

- (一) **性質2.2** 若初始位置 t 與城市 n 連通，且正整數 N 使得 $A^N = [p_{ij}^{(N)}]$ 中的元 $p_{(n+1)t}^{(N)} > 0$ 。則對任意 $k \geq N, k \in \mathbb{N}$ ， $A^k = [p_{ij}^{(k)}]$ 中的元素 $p_{(n+1)t}^{(k)} > 0$ 。

證明：令 $A^k = [a_{ij}^{(k)}]$ ，對 k 使用數學歸納法。

1. $k = N$ 時由連通的定義即知成立。
2. 設 $k = l$ 時成立， $A^l = [a_{ij}^{(l)}]$ 中 $a_{(n+1)s}^{(l)} > 0$ 。而 $k = l + 1$ 時，

$$\begin{aligned} A^{(l+1)} &= [a_{ij}^{(l+1)}] = A \times A^l \text{ 中 } a_{(n+1)s}^{(l+1)} = \sum_{m=1}^{n+1} (a_{(n+1)m} \times a_{ms}^{(l)}) \\ &\geq a_{(n+1)(n+1)} \times a_{(n+1)s}^{(l)} > 0, \quad k = l + 1 \text{ 成立。} \end{aligned}$$

3. 由數學歸納法，根據1、2.知原命題成立。

- (二) 由於任意初始位置與城市 n 連通，令初始位置 i 移動 N_i 次後 $A^{N_i} = [p_{ij}^{(N_i)}]$ 中的元 $p_{(n+1)i}^{(N_i)} > 0, 0 \leq i \leq n - 1, N_i \in \mathbb{N}$ ，故取正整數 N 為 $N_0, N_1, \dots, N_{(n-1)}$ 中的最大值，由1.知若令 $A' = A^N = \begin{bmatrix} Q'_{n \times n} & O_{n \times 1} \\ R'_{1 \times n} & 1 \end{bmatrix}$ ， $R'_{1 \times n}$ 中各元素皆非零。由於轉移矩陣的次方仍為轉移矩陣，可知 A' 各行元素和為1。因此 Q' 中各行元素和小於1。

由 $1 > \|Q'\|_1 \geq \rho(Q')$ ，可知 $\lim_{k \rightarrow \infty} Q'^k = 0$ 。

(三) 令 $(A')^k = \begin{bmatrix} Q'_{n \times n}^{(k)} & O_{n \times 1} \\ R'_{1 \times n}^{(k)} & 1 \end{bmatrix}$ ，其中 $Q'^{(k)} = [q_{ij}^{(k)}]$ ， $R'^{(k)} = [r_{1j}^{(k)}]$ ，則由於

$\lim_{k \rightarrow \infty} Q'^k = O$ ，故 $\lim_{k \rightarrow \infty} q_{ij}^{(k)} = 0, \forall i, j \in \mathbb{N}$ 且 $1 \leq i, j \leq n$ ，再由轉移矩陣各行元

素和為1可知 $\lim_{k \rightarrow \infty} r_{1j}^{(k)} = \lim_{k \rightarrow \infty} (1 - \sum_{i=1}^n q_{ij}^{(k)}) = \lim_{k \rightarrow \infty} 1 - \sum_{i=1}^n \lim_{k \rightarrow \infty} q_{ij}^{(k)}$

$= 1 - \sum_{i=1}^n 0 = 1, \forall j \in \mathbb{N}$ 且 $1 \leq j \leq n$ ，故 $\lim_{k \rightarrow \infty} R'^{(k)} = [1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1]_{1 \times n}$ 。因

$$\text{此 } \lim_{k \rightarrow \infty} A^k = \lim_{k \rightarrow \infty} (A^N)^{\frac{k}{N}} = \lim_{\frac{k}{N} \rightarrow \infty} (A')^{\frac{k}{N}} = \lim_{k \rightarrow \infty} \begin{bmatrix} Q'_{n \times n}^{(k)} & O_{n \times 1} \\ R'_{1 \times n}^{(k)} & 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \lim_{k \rightarrow \infty} Q'^k & \lim_{k \rightarrow \infty} O \\ \lim_{k \rightarrow \infty} R'^{(k)} & \lim_{k \rightarrow \infty} 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}。$$

(四) 給定任意初始機率矩陣 $P_{(n+1) \times 1} = [p_{i1}]$ 代表剛開始移動時的情形。移動 k 次後為

$$A^k P, \text{ 而 } \lim_{k \rightarrow \infty} (A^k P) = \left(\lim_{k \rightarrow \infty} A^k \right) \left(\lim_{k \rightarrow \infty} P \right) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{11} \\ p_{21} \\ p_{31} \\ \vdots \\ p_{n1} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n p_{i1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}。 \text{當移動次數趨近於無限大時，到達城市 } n \text{ 的機率趨近於 } 1。$$

三、證明移動次數的期望值、變異數必定收斂。

定理3.1 當選定了特定城市 n 、每次移動機率固定且任意初始位置與城市 n 連通，則任意初始位置的移動次數期望值、變異數皆存在，非發散至無窮大。

證明：沿用二、的記號，考慮 A 的特徵方程式， $0 = \det(A - \lambda I_{(n+1) \times (n+1)})$

$$= \det \left(\begin{bmatrix} Q_{n \times n} & O_{n \times 1} \\ R_{1 \times n} & 1 \end{bmatrix} - \lambda I_{(n+1) \times (n+1)} \right) = \det \left(\begin{bmatrix} Q_{n \times n} - \lambda I_{n \times n} & O_{n \times 1} \\ R_{1 \times n} & 1 - \lambda \end{bmatrix} \right)$$

$= (1 - \lambda) \det([Q_{n \times n} - \lambda I_{n \times n}])$ 。(依第 $n + 1$ 行展開) 由定理3.1的討論可知 $\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$ 為 A 的穩定

狀態，再由定理0.2可知 A 的特徵根 1 為單根且其他根絕對值小於 1 。因此 $0 =$

$\det([Q_{n \times n} - \lambda I_{n \times n}])$ 的根絕對值皆小於 1 ，即 $Q_{n \times n}$ 的特徵根絕對值皆小於 1 、 $\rho(Q) < 1$ 。

可知 Q 的特徵根沒有 1 、 $\det(Q - I) \neq 0$ ， $Q - I$ 可逆。將上述內容寫作下面引理。

引理3.2 沿用二、的記號， $A = \begin{bmatrix} Q_{n \times n} & O_{n \times 1} \\ R_{1 \times n} & 1 \end{bmatrix}$ 。在 A 有穩定狀態的情況下會有 $\rho(Q) < 1$ 、 $Q - I$ 可逆

設帶原者初始位置分布為 $P_0 = \begin{bmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_{n-1} \end{bmatrix}$ ，其中 p_i 代表初始為位置 i 的機率。帶原者移動 i 後

恰移動到城市 n 的機率，即為 $\sum_{j=0}^{n-1} (\text{第 } i \text{ 次從位置 } j \text{ 移動到位置 } n) (\text{第 } i - 1 \text{ 移動到位置 } j)$ ，

用矩陣乘法表示為 $R_{1 \times n} Q^{i-1} P_0$ 。故期望值為 $\sum_{i=1}^{\infty} i R_{1 \times n} Q^{i-1} P_0 = R_{1 \times n} (\sum_{i=1}^{\infty} i Q^{i-1}) P_0$

$= R_{1 \times n} (\sum_{i=0}^{\infty} (i+1) Q^i) P_0$ 。考慮冪級數 $\sum_{i=0}^{\infty} (i+1)(z-a)^i$ ，由於 $\lim_{i \rightarrow \infty} \left| \frac{(i+1)+1}{i+1} \right| = 1$ 存在，

由比值審斂法，此冪級數收斂半徑 $R = \frac{1}{1} = 1$ ，而 $\rho(Q) < 1 = R$ ，由文獻探討中定理0.1

知 $\sum_{i=0}^{\infty} (i+1) Q^i$ 收斂，即期望值 $R_{1 \times n} (\sum_{i=0}^{\infty} (i+1) Q^i) P_0$ 收斂，期望值存在並無發散至無窮大，設此期望值為 E 。

變異數為 $\sum_{i=1}^{\infty} R_{1 \times n} Q^{i-1} P_0 (i - E)^2 = R_{1 \times n} (\sum_{i=1}^{\infty} i^2 Q^{i-1}) P_0 - E^2$ ，考慮冪級數

$\sum_{i=0}^{\infty} (i+1)^2 (z-a)^i$ ，由於其各項皆非零且 $\lim_{i \rightarrow \infty} \left| \frac{((i+1)+1)^2}{(i+1)^2} \right| = 1$ 存在，由比值審斂法知此

冪級數收斂半徑 $R = \frac{1}{1} = 1$ ，而 $\rho(Q) < 1 = R$ ，由定理0.1知 $\sum_{i=0}^{\infty} (i+1)^2 Q^i$ 收斂，即變異

數 $R_{1 \times n} (\sum_{i=0}^{\infty} (i+1)^2 Q^i) P_0 - E^2$ 收斂，變異數存在並無發散至無窮大。

四、給定每次移動的固定機率，找出不同初始位置期望值、變異數的關係。

此處使用矩陣以及隨機變數的方式，提供兩種不同的過程，導出相同的關係。

(一) 使用矩陣找出期望值關係式

沿用二、的記號，令 $Q_j = \sum_{i=0}^j (i+1)Q^i$ ，則有下列兩式：

(由引理3.2可知 $I - Q$ 可逆)

計算可得 $(I - Q) \times Q_j = I + Q + Q^2 + \dots + Q^j + (j+1)Q^{(j+1)}$

$= \sum_{i=0}^j Q^i + (j+1)Q^{(j+1)}$ 。考慮 Q 的Jordan形式 MJM^{-1} 中，

$$J \text{ 中的一個 Jordan 塊 } J^* = \begin{bmatrix} \lambda & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda \end{bmatrix}_{k \times k}, \text{ 其中 } |\lambda| < 1.$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} (j+1)Q^{(j+1)} = \lim_{j \rightarrow \infty} jQ^j$$

$$= \begin{bmatrix} \lim_{j \rightarrow \infty} j\lambda^j & \lim_{j \rightarrow \infty} jC_1^j \lambda^{j-1} & \lim_{j \rightarrow \infty} jC_2^j \lambda^{j-2} & \dots & \lim_{j \rightarrow \infty} jC_{k-1}^j \lambda^{j-(k-1)} \\ 0 & \lim_{j \rightarrow \infty} j\lambda^j & \lim_{j \rightarrow \infty} jC_1^j \lambda^{j-1} & \dots & \lim_{j \rightarrow \infty} jC_{k-1}^j \lambda^{j-(k-2)} \\ 0 & 0 & \lim_{j \rightarrow \infty} j\lambda^j & \dots & \lim_{j \rightarrow \infty} jC_{k-2}^j \lambda^{j-(k-2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lim_{j \rightarrow \infty} j\lambda^j \end{bmatrix} = 0$$

。且由引理3.2知 $\rho(Q) < 1$ ，其 Neumann 無窮級數 $\sum_{i=0}^{\infty} Q^i$ 收斂且

$$\sum_{i=0}^{\infty} Q^i = (I - Q)^{-1}.$$

$$\text{因此 } \sum_{i=0}^{\infty} (i+1) \times Q^i = \lim_{j \rightarrow \infty} Q_j = (I - Q)^{-1} \lim_{j \rightarrow \infty} \left(\sum_{i=0}^j Q^i + (j+1)Q^{(j+1)} \right)$$

$$= (I - Q)^{-1}((I - Q)^{-1} + 0) = ((I - Q)^{-1})^2$$

性質4.1 $\sum_{i=0}^{\infty} (i+1) \times Q^i = ((I - Q)^{-1})^2$ 。

於定理3.1的證明最後面提及，若初始位置為 $P_0 = \begin{bmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_{n-1} \end{bmatrix}$ ，其中 p_i 代表初始位置

為 i 的機率，則期望值為 $R(\sum_{i=0}^{\infty} (i+1) \times Q^i)P_0 = R((I - Q)^{-1})^2 P_0$ 。由於矩陣

各行和為1，因此

$$[1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1]_{n \times 1} = R + [1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1]_{n \times 1} Q,$$

化簡可得 $R(I - Q)^{-1} = [1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1]_{n \times 1}$ ，寫作下方引理。

引理4.2 沿用二、的記號， $A = \begin{bmatrix} Q_{n \times n} & O_{n \times 1} \\ R_{1 \times n} & 1 \end{bmatrix}$ 。

則 $(I - Q)^{-1} = [1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1]_{n \times 1}$ 。

因此移動次數期望值 $R((I - Q)^{-1})^2 P_0 = [1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1]_{n \times 1} (I - Q)^{-1} P_0$ 。

若令 E_i 代表初始位置為 i 的期望值，則一般情況下

$$P_0 = p_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + p_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + p_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + \dots + p_{n-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix},$$

期望值 $E = [1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1]_{n \times 1} (I - Q)^{-1} P_0$

$$= [1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1]_{n \times 1} (I - Q)^{-1}$$

$$\left(p_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + p_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + p_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + \dots + p_{n-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \right)$$

$$= p_0 E_0 + p_1 E_1 + \dots + p_{n-1} E_{n-1} = \sum_{k=0}^{n-1} (p_k E_k)$$

定理4.3 初始位置 $P_0 = \begin{bmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_{n-1} \end{bmatrix}$ 的期望值 $E = \sum_{k=0}^{n-1} (p_k E_k)$ ， E_i 為初始位置 i 的期望值

接著一一帶入 $E = [1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1]_{n \times 1} (I - Q)^{-1} P_0$ ，

合併可得 $[E_0 \ E_1 \ E_2 \ \dots \ E_{n-1}]$

$$= [1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1]_{n \times 1} (I - Q)^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

$$= [1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1]_{n \times 1} (I - Q)^{-1}$$

此即 $[E_0 \ E_1 \ E_2 \ \dots \ E_{n-1}] = [E_0 \ E_1 \ E_2 \ \dots \ E_{n-1}]Q + [1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1]_{n \times 1}$ ，得到不同初始位置間，期望值的關係式。

$$\text{定理4.4 } [E_0 \ E_1 \ E_2 \ \dots \ E_{n-1}] = [E_0 \ E_1 \ E_2 \ \dots \ E_{n-1}]Q + [1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1]_{n \times 1}$$

(二) 使用隨機變數找出期望值關係式

1. 令隨機變數 X_i 代表移動 i 次後的位置，其取值為 $0, 1, \dots, n$ ，其中 $i = 0, 1, \dots$

將題目的條件轉換如下

- (1) **條件4.5** 到城市 n 不再移動，可視為移動後必為城市 n ，即

$$P(X_i = n | X_{i-1} = n) = 1, \forall i \in \mathbb{N}, \text{ 其中 } P(X_{i-1} = 0) \neq 0。$$

- (2) **條件4.6** 移動機率只跟當前位置有關，與目前總移動次數無關。即

$$P(X_i = a | X_{i-1} = b) = P(X_j = a | X_{j-1} = b), \forall i, j \in \mathbb{N}, a, b \in \mathbb{N} \cup \{0\}, 0 \leq a, b \leq n, \text{ 其中 } P(X_{i-1} = b), P(X_{j-1} = b) \neq 0。$$

故有以下的定義

$$\text{定義4.7 } P(X_i = a | X_{i-1} = b) = p_{ba}, \text{ 為與 } i \text{ 無關的常數。}$$

- (3) **條件4.8** 移動機率只跟當前位置有關，與移動到當前位置的過程無關。

$$\text{即 } P(X_i = x_i | X_{i-1} = x_{i-1} \cap X_{i-2} = x_{i-2} \cap \dots \cap X_0 = x_0)$$

$$= P(X_i = k | X_{i-1} = l)$$

$$, \forall i \in \mathbb{N} \ x_i, x_{i-1}, \dots, x_0 \in \mathbb{N} \cup \{0\}, 0 \leq x_i, x_{i-1}, \dots, x_0 \leq n。$$

2. 計算第 i 次恰好達到城市 n 機率

$$P(X_i = n \cap X_{i-1} \neq n)$$

$$= \sum_{j=0}^{n-1} P(X_i = n \cap X_{i-1} = j) \quad \because X_{i-1} = 0, 1, \dots, n-1 \text{ 為 } X_{i-1} \neq n \text{ 的分割}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\substack{j=0 \\ P(X_{i-1}=j) \neq 0}}^{n-1} P(X_i = n | X_{i-1} = j) P(X_{i-1} = j) \\
&= \sum_{\substack{j=0 \\ P(X_{i-1}=j) \neq 0}}^{n-1} \left(p_{jn} \sum_{k=0}^n P(X_{i-1} = j \cap X_0 = k) \right) \quad \because \text{定義4.7、將 } X_0 \text{ 分割} \\
&\because P(X_{i-1} = j) = 0 \text{ 則 } P(X_{i-1} = j \cap X_0 = k) = 0 \\
&= \sum_{j=0}^{n-1} \left(\sum_{k=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j \cap X_0 = k) \right) = \sum_{k=0}^{n-1} \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j \cap X_0 = k) \right)
\end{aligned}$$

$$\text{性質4.9 } P(X_i = n \cap X_{i-1} \neq n) = \sum_{k=0}^{n-1} \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j \cap X_0 = k) \right)$$

3. 找出計算一般化期望值的算法

定義4.10 初始位置為 l ，即 $P(X_0 = l) = 1$ 的期望值為 E_l ，

其中 $l = 0, 1, \dots, (n-1)$ ，由定理3.1可知 E_l 均收斂且非無限大。

依據期望值的定義與性質4.9可知，此時期望值為

$$\begin{aligned}
E_l &= \sum_{i=1}^{\infty} i P(X_i = n \cap X_{i-1} \neq n) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \left(i \sum_{k=0}^{n-1} \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j \cap X_0 = k) \right) \right) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \left(i \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right)
\end{aligned}$$

因此，一般情況下若給定初始條件，即 X_0 的機率質量函數，

則可計算出期望值 $E = \sum_{i=1}^{\infty} i P(X_i = n \cap X_{i-1} \neq n)$

$$= \sum_{i=1}^{\infty} \left(i \sum_{k=0}^{n-1} \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j \cap X_0 = k) \right) \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{\infty} \left(i \sum_{\substack{k=0 \\ P(X_0=k) \neq 0}}^{n-1} \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = k) P(X_0 = k) \right) \right)$$

∴由定理3.1可知 E_l 均收斂且非無限大，其中 $l = 0, 1, \dots, (n-1)$

$$\begin{aligned} &= \sum_{\substack{k=0 \\ P(X_0=k) \neq 0}}^{n-1} \left(\sum_{i=1}^{\infty} i \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = k) P(X_0 = k) \right) \right) \\ &= \sum_{\substack{k=0 \\ P(X_0=k) \neq 0}}^{n-1} \left(P(X_0 = k) \sum_{i=1}^{\infty} i \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = k) \right) \right) \\ &= \sum_{\substack{k=0 \\ P(X_0=k) \neq 0}}^{n-1} (P(X_0 = k) E_k) \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} (P(X_0 = k) E_k) \quad \because P(X_0 = k) = 0 \text{ 則此項為 } 0 \end{aligned}$$

定理4.3的另一種形式 期望值 $E = \sum_{k=0}^{n-1} (P(X_0 = k) E_k)$ 。

4. 找出當前位置與第一次移動後位置關係(以下 $j \neq n$ 且 $P(X_0 = k) \neq 0$)

$$\begin{aligned} P(X_i = j | X_0 = k) &= \frac{P(X_i = j \cap X_0 = k)}{P(X_0 = k)} \\ &= \frac{\sum_{m=0}^n P(X_i = j \cap X_1 = m \cap X_0 = k)}{P(X_0 = k)} \quad \because X_1 = 0, 1, \dots, n \text{ 為 } X_1 \text{ 的分割} \\ &= \sum_{\substack{m=0 \\ P(X_1=m \cap X_0=k) \neq 0}}^{n-1} \frac{P(X_i = j \cap X_1 = m \cap X_0 = k)}{P(X_1 = m \cap X_0 = k)} \times \frac{P(X_1 = m \cap X_0 = k)}{P(X_0 = k)} \\ &= \sum_{\substack{m=0 \\ P(X_1=m \cap X_0=k) \neq 0}}^{n-1} P(X_i = j | X_1 = m \cap X_0 = k) \times P(X_1 = m | X_0 = k) \end{aligned}$$

$$\text{其中 } P(X_i = j | X_1 = m \cap X_0 = k) = \frac{P(X_i = j \cap X_1 = m \cap X_0 = k)}{P(X_1 = m \cap X_0 = k)}$$

(將 X_2, X_3, \dots, X_{i-1} 分割)

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\substack{0 \leq x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \leq n \\ x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \in \mathbb{N}}} \frac{P(X_i = j \cap X_{i-1} = x_{i-1} \cap \dots \cap X_2 = x_2 \cap X_1 = m \cap X_0 = k)}{P(X_1 = m \cap X_0 = k)} \\
&= \sum_{\substack{0 \leq x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \leq n \\ x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \in \mathbb{N} \\ \text{分母不為0}}} \frac{P(X_i = j \cap X_{i-1} = x_{i-1} \cap \dots \cap X_2 = x_2 \cap X_1 = m \cap X_0 = k)}{P(X_{i-1} = x_{i-1} \cap \dots \cap X_2 = x_2 \cap X_1 = m \cap X_0 = k)} \\
&\quad \times \frac{P(X_{i-1} = x_{i-1} \cap X_{i-2} = x_{i-2} \cap \dots \cap X_2 = x_2 \cap X_1 = m \cap X_0 = k)}{P(X_{i-2} = x_{i-2} \cap \dots \cap X_2 = x_2 \cap X_1 = m \cap X_0 = k)} \\
&\quad \times \dots \times \frac{P(X_2 = x_2 \cap X_1 = m \cap X_0 = k)}{P(X_1 = m \cap X_0 = k)} \quad \because \text{分母為0則原本那項為0} \\
&= \sum_{\substack{0 \leq x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \leq n \\ x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \in \mathbb{N} \\ \text{條件機率有定義}}} P(X_i = j | X_{i-1} = x_{i-1} \cap \dots \cap X_2 = x_2 \cap X_1 = m \cap X_0 = k) \\
&\quad \times P(X_{i-1} = x_{i-1} | X_{i-2} = x_{i-2} \cap \dots \cap X_2 = x_2 \cap X_1 = m \cap X_0 = k) \\
&\quad \times \dots \times P(X_2 = x_2 | X_1 = m \cap X_0 = k) \\
&= \sum_{\substack{0 \leq x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \leq n \\ x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \in \mathbb{N} \\ \text{條件機率有定義}}} P(X_i = j | X_{i-1} = x_{i-1}) \times P(X_{i-1} = x_{i-1} | X_{i-2} = x_{i-2}) \times \dots \\
&\quad \times P(X_2 = x_2 | X_1 = m) \quad \because \text{條件4.8} \\
&= \sum_{\substack{0 \leq x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \leq n \\ x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \in \mathbb{N}}} P(X_{i-1} = j | X_{i-2} = x_{i-1}) \times P(X_{i-2} = x_{i-2} | X_{i-3} = x_{i-2}) \times \dots \\
&\quad \times P(X_1 = x_2 | X_0 = m) \quad \because \text{條件4.6, 條件機率無定義則那項為0} \\
&= \sum_{\substack{0 \leq x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \leq n \\ x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \in \mathbb{N} \\ \text{條件機率有定義}}} P(X_{i-1} = j | X_{i-2} = x_{i-1}) \times P(X_{i-2} = x_{i-1} | X_{i-3} = x_{i-2}) \times \dots \\
&\quad \times P(X_1 = x_2 | X_0 = m) \quad \because \text{條件機率無定義則那項為0}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\substack{0 \leq x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \leq n \\ x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \in \mathbb{N} \\ \text{條件機率有定義}}} P(X_{i-1} = j | X_{i-2} = x_{i-1} \cap \dots \cap X_1 = x_2 \cap X_0 = m) \\
&\quad \times P(X_{i-2} = x_{i-1} | X_{i-3} = x_{i-2} \cap \dots \cap X_1 = x_2 \cap X_0 = m) \times \dots \\
&\quad \times P(X_1 = x_2 | X_0 = m) \quad \because \text{條件4.8} \\
&= \sum_{\substack{0 \leq x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \leq n \\ x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \in \mathbb{N} \\ \text{分母不為0}}} \frac{P(X_{i-1} = j \cap X_{i-2} = x_{i-1} \cap \dots \cap X_1 = x_2 \cap X_0 = m)}{P(X_{i-2} = x_{i-1} \cap \dots \cap X_1 = x_2 \cap X_0 = m)} \\
&\quad \times \frac{P(X_{i-2} = x_{i-1} \cap X_{i-3} = x_{i-2} \cap \dots \cap X_1 = x_2 \cap X_0 = m)}{P(X_{i-3} = x_{i-2} \cap \dots \cap X_1 = x_2 \cap X_0 = m)} \times \dots \\
&\quad \times \frac{P(X_1 = x_2 \cap X_0 = m)}{P(X_0 = m)} \\
&= \sum_{\substack{0 \leq x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \leq n \\ x_2, x_3, \dots, x_{i-1} \in \mathbb{N}}} \frac{P(X_{i-1} = j \cap X_{i-2} = x_{i-1} \cap \dots \cap X_1 = x_2 \cap X_0 = m)}{P(X_0 = m)} \\
&\quad \because \text{原本分母為0則此時分子為0} \\
&= \frac{P(X_{i-1} = j \cap X_0 = m)}{P(X_0 = m)} \quad \because \text{為 } X_1, X_2, \dots, X_{i-2} \text{ 的分割} \\
&= P(X_{i-1} = j | X_0 = m)
\end{aligned}$$

備註：此時可以發現和原本的 $X_0 = k$ 無關

因此 $P(X_i = j | X_0 = k)$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\substack{m=0 \\ P(X_1=m \cap X_0=k) \neq 0}}^{n-1} P(X_i = j | X_1 = m \cap X_0 = k) \times P(X_1 = m | X_0 = k) \\
&= \sum_{\substack{m=0 \\ P(X_1=m \cap X_0=k) \neq 0}}^{n-1} P(X_{i-1} = j | X_0 = m) \times p_{km} \\
&= \sum_{m=0}^{n-1} p_{km} P(X_{i-1} = j | X_0 = m) \quad \because P(X_1 = m \cap X_0 = k) = 0 \text{ 則 } p_{km} \text{ 為 } 0
\end{aligned}$$

性質4.11 $P(X_i = j | X_0 = k) = \sum_{m=0}^{n-1} p_{km} P(X_{i-1} = j | X_0 = m)$ 。

5. 找出 E_l 間的關係

$$\begin{aligned}
E_l &= \sum_{i=1}^{\infty} \left(i \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right) \\
&= \sum_{i=2}^{\infty} \left(i \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right) + \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_0 = j | X_0 = l) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \left((i+1) \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_i = j | X_0 = l) \right) + \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_0 = j | X_0 = l) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \left(i \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_i = j | X_0 = l) \right) + \sum_{i=1}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_i = j | X_0 = l) \right) \\
&\quad + \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_0 = j | X_0 = l) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \left(i \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} \sum_{m=0}^{n-1} p_{lm} P(X_{i-1} = j | X_0 = m) \right) + \sum_{i=2}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right) \\
&\quad + \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_0 = j | X_0 = l) \quad (\text{由性質4.6}) \\
&= \sum_{m=0}^{n-1} \left(p_{lm} \sum_{i=1}^{\infty} \left(i \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = m) \right) \right) \\
&\quad + \sum_{i=1}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right) \quad \because \text{由定理3.1可知 } E_l \text{ 均收斂且非無窮大} \\
&= \sum_{m=0}^{n-1} (p_{lm} E_m) + 1 \quad \because \text{由定理2.1可知 } \sum_{i=1}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right) = 1
\end{aligned}$$

定理4.4的另一種形式 $E_l = \sum_{m=0}^{n-1} (p_{lm} E_m) + 1, l = 0, 1, \dots, (n-1)$,

與使用矩陣推導結果相同。

(三) 使用矩陣找出變異數關係式

沿用三、的記號，令 $Q_k = \sum_{i=0}^k (i+1)^2 Q^i$ ，

$$\begin{aligned} \text{計算可得 } (I - Q) \times Q_k &= I + 3Q + 5Q^2 + \dots + (2k+1)Q^k + (k+1)^2 Q^{(k+1)} \\ &= 2\left(\sum_{i=0}^k (i+1) \times Q^i\right) - \sum_{i=0}^k Q^i + (k+1)^2 Q^{(k+1)}, \end{aligned}$$

考慮 Q 的 *Jordan* 形式 MJM^{-1} 中， J 中的一個 *Jordan* 塊

$$J^* = \begin{bmatrix} \lambda & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda \end{bmatrix}_{l \times l}, \text{ 其中 } |\lambda| < 1.$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (k+1)^2 Q^{(k+1)} = \lim_{k \rightarrow \infty} k^2 Q^k$$

$$= \begin{bmatrix} \lim_{k \rightarrow \infty} k^2 \lambda^k & \lim_{k \rightarrow \infty} k^2 C_1^k \lambda^{k-1} & \lim_{k \rightarrow \infty} k^2 C_2^k \lambda^{k-2} & \dots & \lim_{k \rightarrow \infty} k C_{l-1}^k \lambda^{k-(l-1)} \\ 0 & \lim_{k \rightarrow \infty} k^2 \lambda^k & \lim_{k \rightarrow \infty} k^2 C_1^k \lambda^{k-1} & \dots & \lim_{k \rightarrow \infty} k C_{l-1}^k \lambda^{k-(l-2)} \\ 0 & 0 & \lim_{k \rightarrow \infty} k^2 \lambda^k & \dots & \lim_{k \rightarrow \infty} k C_{k-2}^k \lambda^{k-(l-2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lim_{k \rightarrow \infty} k^2 \lambda^k \end{bmatrix} = O.$$

又由性質4.1、Neumann 無窮級數可知

$$\sum_{i=0}^{\infty} (i+1)Q^i = ((I - Q)^{-1})^2, \quad \sum_{i=0}^{\infty} Q^i = (I - Q)^{-1},$$

$$\text{因此 } \sum_{i=0}^{\infty} (i+1)^2 Q^i = \lim_{k \rightarrow \infty} Q_k$$

$$= (I - Q)^{-1} \lim_{k \rightarrow \infty} \left(2 \left(\sum_{i=0}^k (i+1)Q^i \right) - \sum_{i=0}^k Q^i + (k+1)^2 Q^{(k+1)} \right)$$

$$= (I - Q)^{-1} (2((I - Q)^{-1})^2 - (I - Q)^{-1} + O) = 2((I - Q)^{-1})^3 - ((I - Q)^{-1})^2$$

$$\text{於定理3.1的證明最後面提及，若初始狀態為 } P_0 = \begin{bmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_{n-1} \end{bmatrix},$$

其中 p_i 代表初始位置為 i 的機率，則移動次數變異數

$$\begin{aligned}
 Var &= R_{1 \times n} \left(\sum_{i=0}^{\infty} (i+1)^2 Q^i \right) P_0 - E^2 \\
 &= R(2((I-Q)^{-1})^3 - ((I-Q)^{-1})^2) P_0 - E^2 \\
 &= 2R((I-Q)^{-1})^3 P_0 - R((I-Q)^{-1})^2 P_0 - E^2 \\
 &= 2R((I-Q)^{-1})^3 P_0 - E - E^2
 \end{aligned}$$

(於上方(一)提過 $R((I-Q)^{-1})^2 P_0 = E$)

由引理4.2可化簡為 $Var = [2 \ 2 \ 2 \ \dots \ 2]_{n \times 1} ((I-Q)^{-1})^2 P_0 - E - E^2$ 。

可用以直接計算變異數。

再來，改以 $Var + E^2 = R_{1 \times n} (\sum_{i=0}^{\infty} (i+1)^2 \times Q^i) P_0$ 找出較快計算方法。

若令 Var_i 代表初始位置為 i 的變異數，則一般情況下

$$\begin{aligned}
 P_0 &= p_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + p_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + p_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + \dots + p_{n-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \\
 Var + E^2 &= R_{1 \times n} \left(\sum_{i=0}^{\infty} (i+1)^2 Q^i \right) P_0 \\
 &= R_{1 \times n} \left(\sum_{i=0}^{\infty} (i+1)^2 Q^i \right) \left(p_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + p_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + p_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + \dots + p_{n-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \right) \\
 &= p_0 (Var_0 + (E_0)^2) + p_1 (Var_1 + (E_1)^2) + \dots + p_{n-1} (Var_{n-1} + (E_{n-1})^2) \\
 &= \sum_{k=0}^{n-1} (p_k (Var_k + (E_k)^2))
 \end{aligned}$$

定理4.12 初始狀態為 $P_0 = \begin{bmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_{n-1} \end{bmatrix}$ 的移動次數變異數

$$Var = \sum_{k=0}^{n-1} (p_k(Var_k + (E_k)^2)) - E^2。其中Var_i代表初始位置為i的變異數$$

接著帶入 $Var + E + E^2 = [2 \ 2 \ 2 \ \dots \ 2]_{n \times 1} ((I - Q)^{-1})^2 P_0$ ，

合併可得 $[Var_0 + E_0 + (E_0)^2 \quad Var_1 + E_1 + (E_1)^2 \quad \dots \quad Var_{n-1} + E_{n-1} + (E_{n-1})^2]$

$$= [2 \ 2 \ 2 \ \dots \ 2]_{n \times 1} ((I - Q)^{-1})^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

$$= 2 \times ([1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1]_{n \times 1} (I - Q)^{-1}) (I - Q)^{-1}$$

$$= 2[E_0 \ E_1 \ E_2 \ \dots \ E_{n-1}] (I - Q)^{-1} \text{ (定理4.3)}$$

移項可得 $[Var_0 + (E_0)^2 \quad Var_1 + (E_1)^2 \quad \dots \quad Var_{n-1} + (E_{n-1})^2]$

$$= [2E_0 \ 2E_1 \ 2E_2 \ \dots \ 2E_{n-1}] (I - Q)^{-1} - [E_0 \ E_1 \ E_2 \ \dots \ E_{n-1}]$$

$$= [2E_0 - 1 \ 2E_1 - 1 \ 2E_2 - 1 \ \dots \ 2E_{n-1} - 1] (I - Q)^{-1} \text{ (定理4.3)}$$

得到不同初始位置間，變異數的關係式。

定理4.13 $[Var_0 + (E_0)^2 \quad Var_1 + (E_1)^2 \quad \dots \quad Var_{n-1} + (E_{n-1})^2]$

$$= [2E_0 - 1 \ 2E_1 - 1 \ 2E_2 - 1 \ \dots \ 2E_{n-1} - 1] (I - Q)^{-1}。$$

(四) 使用隨機變數找出關係式

沿用上方(三)的記號，並給出以下的定義

定義4.14 初始位置為 l ，即 $P(X_0 = l) = 1$ 的變異數為 Var_l ，

其中 $l = 0, 1, \dots, (n - 1)$ ，由定理3.1可知 Var_l 均收斂且非無限大。

依據變異數的定義與性質4.9可知，此時變異數為

$$\begin{aligned}
Var_l &= \sum_{i=1}^{\infty} (i - E_l)^2 P(X_i = n \cap X_{i-1} \neq n) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \left((i - E_l)^2 \sum_{k=0}^{n-1} \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j \cap X_0 = k) \right) \right) + 2(E_l)^2 - (E_l)^2 - (E_l)^2 \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \left((i - E_l)^2 \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right) \\
&\quad + 2E_l \sum_{i=1}^{\infty} \left(i \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right) \\
&\quad - (E_l)^2 \sum_{i=1}^{\infty} \left(i \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right) - (E_l)^2 \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \left(i^2 \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right) - (E_l)^2
\end{aligned}$$

因此，一般情況下若給定初始條件，即 X_0 的機率質量函數，則可計算出變異數

$$\begin{aligned}
Var &= \sum_{i=1}^{\infty} (i - E)^2 P(X_i = n \cap X_{i-1} \neq n) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} (i - E)^2 P(X_i = n \cap X_{i-1} \neq n) + 2E^2 - E^2 - E^2 \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} ((i - E)^2 P(X_i = n \cap X_{i-1} \neq n)) + 2E \sum_{i=1}^{\infty} (i P(X_i = n \cap X_{i-1} \neq n)) \\
&\quad - E^2 \sum_{i=1}^{\infty} (i P(X_i = n \cap X_{i-1} \neq n)) - E^2 = \sum_{i=1}^{\infty} (i^2 P(X_i = n \cap X_{i-1} \neq n)) - E^2 \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \left(i^2 \sum_{k=0}^{n-1} \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j \cap X_0 = k) \right) \right) - E^2
\end{aligned}$$

∴由定理3.1可知 Var_l 均收斂且非無限大，其中 $l = 0, 1, \dots, (n-1)$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{k=0}^{n-1} \left(\sum_{i=1}^{\infty} i^2 \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j \cap X_0 = k) \right) \right) - E^2 \\
 &= \sum_{\substack{k=0 \\ P(X_0=k) \neq 0}}^{n-1} \left(P(X_0 = k) \sum_{i=1}^{\infty} i \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = k) \right) \right) - E^2 \\
 &= \sum_{\substack{k=0 \\ P(X_0=k) \neq 0}}^{n-1} (P(X_0 = k)(Var_k + (E_k)^2) - E^2) \\
 &= \sum_{k=0}^{n-1} (P(X_0 = k)(Var_k + (E_k)^2)) - E^2 \quad \because P(X_0 = k) = 0 \text{ 則此項為 } 0
 \end{aligned}$$

定理4.12的另一種形式 變異數 $Var = \sum_{k=0}^{n-1} (P(X_0 = k)(Var_k + (E_k)^2)) - E^2$ 。

接著一樣嘗試找出 Var_l 間的關係

$$\begin{aligned}
 Var_l &= \sum_{i=1}^{\infty} \left(i^2 \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right) - (E_l)^2 \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \left(i^2 \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right) + 2E_l - 2 \sum_{i=1}^{\infty} \left(i \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right) \\
 &\quad + \sum_{i=1}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right) - 1 - (E_l)^2 \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \left((i-1)^2 \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = l) \right) + 2E_l - 1 - (E_l)^2 \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \left(i^2 \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_i = j | X_0 = l) \right) - (E_l - 1)^2 \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \left(i^2 \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} \sum_{k=0}^{n-1} p_{lk} P(X_{i-1} = j | X_0 = k) \right) - (E_l - 1)^2 \quad (\text{由性質4.9})
 \end{aligned}$$

$$= \sum_{k=0}^{n-1} \left(p_{lk} \sum_{i=1}^{\infty} i^2 \sum_{j=0}^{n-1} p_{jn} P(X_{i-1} = j | X_0 = k) \right) - (E_l - 1)^2$$

$$= \sum_{k=0}^{n-1} (p_{lk}(\text{Var}_k + (E_k)^2) - (E_l - 1)^2)$$

定理4.13的另一種形式 $\text{Var}_l = \sum_{k=0}^{n-1} (p_{lk}(\text{Var}_k + (E_k)^2) - (E_l - 1)^2), l = 0, 1, \dots, n - 1$ 。

五、收集2022年5月臺灣感染人數，找出最適矩陣進行擬合

(一) 數據收集與處理

為了求轉移矩陣，必須先有數據。我採用下方步驟進行數據處理與收集

1. 由 CDC(衛生福利部疾病管制署)每日的新聞稿，手動將各縣市感染人數打成 Excel 表格，並依據日期、縣市進行分類，以5/1~5/5部分縣市舉例如表一。

每日感染人數	5月1日	5月2日	5月3日	5月4日	5月5日
台北市	4134	3718	4806	5538	6422
新北市	5810	6584	8278	10151	10155
基隆市	792	874	1220	1003	924
宜蘭縣	314	397	448	525	675
桃園市	2784	2577	3604	4814	4872

表一、5/1~5/5部分縣市感染人數 作者繪製 資料取自 CDC 新聞稿

<https://www.cdc.gov.tw/Bulletin/List/MmgtpeidAR5Ooai4-fgHzQ>

2. 依據交通部觀光局，將各縣市依據北部、中部、東部、南部與離島，將其分別加總感染人數，以5/1~5/5各區數據舉例如表二。

各區感染人數	5月1日	5月2日	5月3日	5月4日	5月5日
北部	14182	14453	18860	22755	23812
中部	1343	1351	1882	2582	2759
南部	1021	1480	1785	2456	2657

東部	350	480	530	567	777
離島	40	37	45	60	63

表二、5/1~5/5各區感染人數 作者繪製

其中各區域分類如表三

北部	臺北市、新北市、基隆市、宜蘭縣、桃園市、新竹縣及新竹市
中部	苗栗縣、臺中市、彰化縣、南投縣及雲林縣
南部	嘉義市、嘉義縣、台南市、高雄市及屏東縣
東部	花蓮縣、台東縣
離島	澎湖縣、連江縣、金門縣

表三、各區域縣市分類 作者繪製 資料取自交通部觀光局

<https://www.taiwan.net.tw/ml.aspx?sNo=0001016>

3. 為了降低短時間擾動所造成的影響，將每日數據與前、後一天數據進行平均得到平均感染人口，例如：5/1、5/2、5/3感染人口數相加除以3為5/2的平均感染人口。部分資料如表四所示。

平均感染人數	5月2日	5月3日	5月4日	5月5日	5月6日
北部	15832	18689	21809	25219	29898
中部	1525	1938	2408	2828	3303
南部	1429	1907	2299	2812	3459
東部	453	526	625	632	797
離島	41	47	56	61	80

表四、111/05部分縣市平均感染人數 作者繪製

4. 收集內政部戶政司全球資訊網中，111年5月的人口數，並依各區人口加總。部分城市及各區人口數如表五

分縣市(部分)	總人口數	分區	總人口數
台北市	2470599	北部	10542832
新北市	3972841	中部	5730504

基隆市	361320	南部	6130224
宜蘭縣	448933	東部	532275
桃園市	2262765	離島	260343

表五、111/05部分縣市總人口數以及各區總人口數 作者繪製 資料取自內政部戶政司全球資訊網 各月人口資料 縣市人口結構指標 <https://www.ris.gov.tw/app/portal/346>

5. 將步驟3所得資料除以表五中各區人口數，得到各縣市感染比例，以避免因為各縣市人數不同造成偏差，並將每日感染比例加總。部分感染比例如表六所示

感染比例	5月2日	5月3日	5月4日	5月5日	5月6日
北部	0.150%	0.177%	0.207%	0.239%	0.284%
中部	0.027%	0.034%	0.042%	0.049%	0.058%
南部	0.023%	0.031%	0.038%	0.046%	0.056%
東部	0.085%	0.099%	0.117%	0.119%	0.150%
離島	0.016%	0.018%	0.022%	0.023%	0.031%
總和	0.301%	0.359%	0.425%	0.476%	0.578%

表六、111/05各區感染比例 作者繪製

6. 將步驟5所得的數據除以當日感染比例總和，成為感染相對比率。此時感染相對比率和為1，可將其當作機率矩陣使用。部分數據如表七所示。

各區相對比率	5月2日	5月3日	5月4日	5月5日	5月6日
北部	0.4991	0.4936	0.4864	0.5021	0.4906
中部	0.0885	0.0942	0.0988	0.1036	0.0997
南部	0.0775	0.0866	0.0882	0.0963	0.0976
東部	0.2831	0.2750	0.2760	0.2491	0.2591
離島	0.0519	0.0506	0.0506	0.0489	0.0529
總和	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%	100.00%

表七、111/05各區感染相對比率 作者繪製

7. 將5/2~5/29每日感染相對比率作為行向量形成 5×28 矩陣A，其中A的第j行為5月

$j + 1$ 日的感染數據，各列依序為北部、中部、南部、東部與離島數據。同理將5/3~5/30每日感染相對比率作為行向量形成 5×28 矩陣 B ，其中 B 的第 j 行為5月 $j + 2$ 日的感染數據。如此一來，可視為 A 的第 j 行經過轉移後成為 B 的第 j 行，若轉移矩陣為 X ，則 $XA = B$ 。

(二) 最適轉移矩陣計算方式

由於上方所得數據中 A, B 為 5×28 矩陣、 X 為 5×5 矩陣， A, B 尺寸過大，通常無法解得 X 使得 $XA = B$ 。在一般化的推廣下，設 A, B 為 $n \times m$ 矩陣， X 為 $n \times n$ 轉移矩陣，我欲求得 X 使得 $XA - B$ 的 Frobenius 範數 $\|XA - B\|_F$ 有最小值。注意到如果 $XA = B$ 真的有解 $X = X_0$ ，則 $\|X_0A - B\|_F = \|0\|_F = 0$ 必為最小值。

備註：矩陣 $M = [m_{ij}]_{m \times n}$ 的 Frobenius 範數為 $\|M\|_F = \sqrt{\sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n m_{ij}^2} = \sqrt{\text{tr}(M^T M)}$

1. 將 X 為轉移矩陣的條件列出，設 $X = [x_{ij}]_{n \times n}$ ，則 x_{ij} 必須滿足 $1 \geq x_{ij} \geq 0$ 及 $\sum_{i=0}^n x_{ij} = 1, j = 1, \dots, n$ 。注意到在 $\sum_{i=0}^n x_{ij} = 1$ 的限制下， $1 \geq x_{ij} \geq 0$ 可以簡化成 $x_{ij} \geq 0$ 。如此一來，原題目成為有等式限制條件、不等式限制條件的極值問題，可以用 KKT 條件求解。
2. 然而，KKT 求解後不等式的驗證較為麻煩，因此觀察到 $x_{ij} \geq 0$ 可以用代數變換替換掉。因此我設 $y_{ij} \in \mathbb{R}, 1 \leq i, j \leq n$ ，如此一來 $x_{ij} \geq 0$ 的條件自動成立。帶回原式，設 $Y = [y_{ij}]_{n \times n}$ ，則 $X = Y^{\circ 2}$ ，其中 $Y^{\circ 2}$ 表示阿達瑪乘積的平方， $Y^{\circ 2} = [y_{ij}^2]$ 。而 $\sum_{i=0}^n x_{ij} = 1$ 可用矩陣乘法表示成 $\vec{1}^T X = \vec{1}^T$ ，其中 $\vec{1} = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}_{n \times 1}$ 為行向量， T 表示矩陣轉置。另外，由於 $\|Y^{\circ 2}A - B\|_F \geq 0$ ，欲求 $\|Y^{\circ 2}A - B\|_F$ 的極小值也可以視為求 $\|Y^{\circ 2}A - B\|_F^2$ 的極小值。將上述轉換後問題統整如下。

備註：矩陣 $P = [p_{ij}]_{m \times n}, Q = [q_{ij}]_{m \times n}$ 的阿達瑪乘積為 $P \circ Q = [p_{ij}q_{ij}]_{m \times n}$ ，且定義 $P^{\circ 2} = P \circ P = [p_{ij}^2]$ 。

問題5.1 給定兩 $n \times m$ 矩陣 A, B 分別代表轉移前、後的數據，求 $Y = [y_{ij}]_{n \times n}$ 滿足 $\vec{1}^T Y^{\circ 2} = \vec{1}^T$ ，使得 $\|Y^{\circ 2} A - B\|_F^2$ 有最小值。若能求得 Y ，此時 $X = Y^{\circ 2}$ 為對應於 A, B 的最適轉移矩陣。

3. 使用拉格朗日乘數法，令對應於限制條件 $\sum_{i=0}^n x_{ij} = 1$ 的參數為 α_j ，則拉格朗日為
- $$L(Y, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \|Y^{\circ 2} A - B\|_F^2 - \sum_{j=1}^n \alpha_j (\sum_{i=0}^n x_{ij} - 1)$$

$$= \text{tr}((Y^{\circ 2} A - B)^T (Y^{\circ 2} A - B)) - \text{tr}(\vec{\alpha} (\vec{1}^T Y^{\circ 2} - \vec{1}^T))$$

，其中 $\vec{\alpha} = [\alpha_j]_{n \times 1}$ 為行向量。

欲求極小值發生條件，將 L 對 y_{ij} 偏微分設為0求解。由鏈鎖律，可知

$$\frac{\partial L}{\partial y_{ij}} = \frac{\partial L}{\partial y_{ij}^2} \times \frac{\partial y_{ij}^2}{\partial y_{ij}} = \frac{\partial L}{\partial y_{ij}^2} \times 2y_{ij}$$

。轉換成矩陣微分，可發現其為 L 對 Y 偏微分為零矩陣，並且由上方推導知即為

$$\frac{\partial L}{\partial Y} = \left[\frac{\partial L}{\partial y_{ij}} \right] = \left[\frac{\partial L}{\partial y_{ij}^2} \times 2y_{ij} \right] = 2 \left[\frac{\partial L}{\partial y_{ij}^2} \right] \circ Y = 2 \frac{\partial L}{\partial Y^{\circ 2}} \circ Y$$

把 $Y^{\circ 2}$ 換回 X ，則有 $\frac{\partial L}{\partial Y^{\circ 2}} = \frac{\partial L}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial X} \left(\text{tr}((XA - B)^T (XA - B)) - \text{tr}(\vec{\alpha} (\vec{1}^T X - \vec{1}^T)) \right)$

$$= \frac{\partial}{\partial X} \left(\text{tr}(A^T X^T X A - B^T X A - A^T X^T B + B^T B) - \text{tr}(\vec{\alpha} \vec{1}^T X) + \text{tr}(\vec{\alpha} \vec{1}^T) \right)$$

$$= \frac{\partial}{\partial X} \left(\text{tr}(X A A^T X^T) - 2 \text{tr}(A B^T X) + \text{tr}(B^T B) - \text{tr}(\vec{\alpha} \vec{1}^T X) + \text{tr}(\vec{\alpha} \vec{1}^T) \right)$$

(運用到跡數轉置不變性、循環不變性及線性函數的性質)

$$= X(AA^T + (AA^T)^T) - 2(AB^T)^T + 0 - (\vec{\alpha} \vec{1}^T)^T + 0$$

(運用到參考資料中跡數的微分公式)

$$= 2XAA^T - 2BA^T - \vec{1} \vec{\alpha}^T$$

因此 $\frac{\partial L}{\partial Y} = 0$ 即為 $(2Y^{\circ 2} AA^T - 2BA^T - \vec{1} \vec{\alpha}^T) \circ Y = 0$ 。

為方便計算，令 $C = 2AA^T = [c_{ij}]_{n \times n}$ ， $D = 2BA^T = [d_{ij}]_{n \times n}$ 皆為給定的矩陣。故

我們僅須解 $(Y^{\circ 2} C - D - \vec{1} \vec{\alpha}^T) \circ 2Y = 0$ 、 $\vec{1}^T Y^{\circ 2} - \vec{1}^T = 0$ 即可。

將上述矩陣方程式轉回聯立方程式

$$f_{ij} = \left(\sum_{k=1}^n y_{ik}^2 c_{kj} - d_{ij} - \lambda_j \right) y_{ij} = 0, 1 \leq i, j \leq n$$

$$g_j = \sum_{i=1}^n y_{ij}^2 - 1 = 0, 1 \leq j \leq n$$

為了使用牛頓法，將 f_{ij}, g_j 進行偏微分，有以下之結果

$$(1) \frac{\partial g_j}{\partial y_{pj}} = 2y_{pj}, 1 \leq p \leq n; \text{其他情況為} 0$$

$$(2) \frac{\partial f_{ij}}{\partial y_{ij}} = \sum_{k=1}^n y_{ik}^2 c_{kj} - d_{ij} - \lambda_j + 2c_{jj}y_{ij}^2$$

$$(3) \frac{\partial f_{ij}}{\partial y_{iq}} = 2y_{iq}c_{qj}y_{ij}, q \neq j, 1 \leq q \leq n; \text{其他情況為} 0$$

$$(4) \frac{\partial f_{ij}}{\partial \lambda_j} = -y_{ij}; \text{其他情況為} 0$$

因此，我們可藉由上方關係式，將 $n^2 + n$ 個變數 y_{ij}, α_j 排成行向量進行牛頓法迭代。

(三) 程式設計與運行

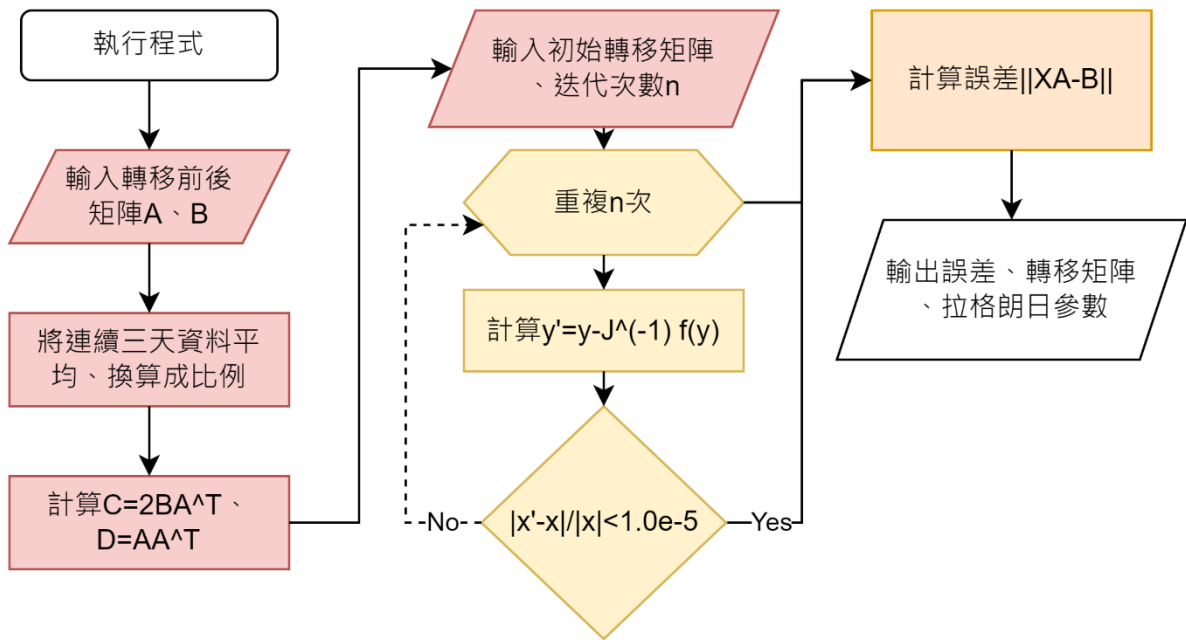
1. 初始值迭代

首先，我嘗試設計輸入初始轉移矩陣、矩陣數據 A, B 以及迭代次數 n 後，能夠自行計算迭代的程式。

其中，設每次迭代前、後的近似解為 \vec{x}', \vec{x} ，當迭代時出現相對誤差

$$\frac{|\vec{x}' - \vec{x}|}{|\vec{x}|} < 10^{-5} \text{時，中斷迭代以節省時間。在最後迭代完畢時，計算轉移誤差}$$

$\|XA - B\|_F$ ，並輸出所求得之解。程式流程圖如下圖一所示。

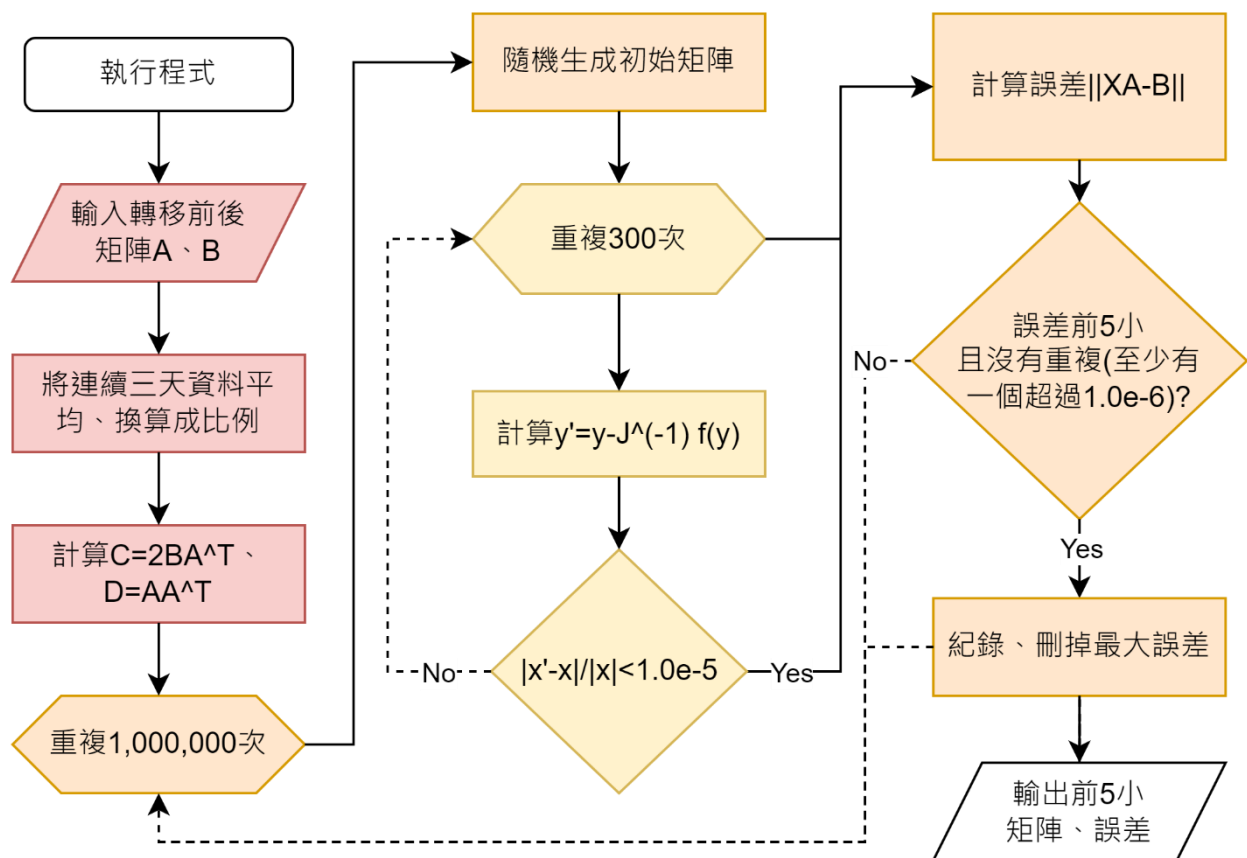


圖一、初始值迭代程式流程圖 作者繪製

2. 隨機撒點迭代

由於人工設計、輸入初始矩陣十分耗費精神，因此我改讓電腦自行生成初始矩陣迭代。如同初始值迭代程式，輸入初始轉移矩陣、矩陣數據 A, B ，使電腦產生1,000,000比初始值，每筆進行300次的迭代。

與之前相同，相對誤差 $\frac{|\bar{x}' - \bar{x}|}{|\bar{x}|} < 10^{-5}$ 時，中斷迭代以節省時間。在每次迭代完畢時，計算轉移誤差 $\|XA - B\|_F$ ，比較並記錄誤差前五小的相異矩陣（若兩矩陣有其中一元相差超過 10^{-6} ，視兩者為不同矩陣）。在全部初始值迭代完畢後，輸出所求得之前五小誤差矩陣。程式流程圖如下圖二所示。



圖二、隨機撒點迭代程式流程圖 作者繪製

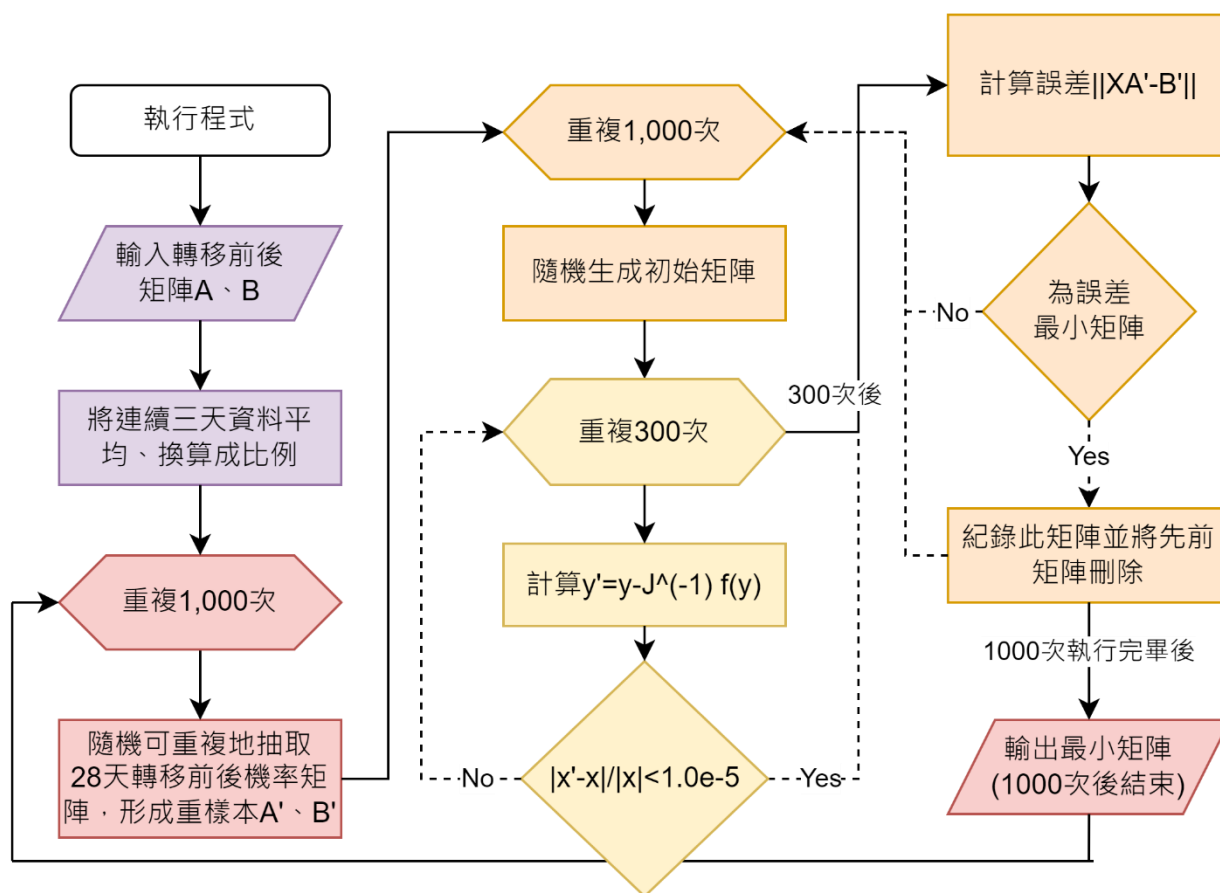
(四) 轉移矩陣處理

在以上方程式、資料獲得最適轉移矩陣後，以點代表都市、箭頭粗細代表轉移機率繪圖以方便閱讀。同時，去計算穩定狀態、固定特殊城市下轉移天數的期望值、變異數。並以轉移矩陣對角線上元大小當作相對控制疫情程度。請參考下方研究成果部分。

(五) 使用自助抽樣法計算信賴區間

由於上方(三)只能獲得單一的矩陣，無法給出誤差(標準差)的估計。因此我利用5月的數據進行自助抽樣法，求出1000個轉移矩陣、以5/31資料進行轉移的6/1~6/30估計。將轉移矩陣各元、6/1~6/30的機率向量各元視為獨立的資料，利用1000筆資料求得標準差 σ 、平均值 μ ，再求出95%信賴區間 $\left[\mu - \frac{2\sigma}{\sqrt{n}}, \mu + \frac{2\sigma}{\sqrt{n}}\right]$ 。其中， n 為5月樣本數，由於將前後三天進行平均並進行轉移，5/2為5/1~5/3感染人數的平均，輸入

的資料為5/2~5/29轉移到5/3~5/30共28筆數據， $n = 28$ 。具體程式流程如下。



圖三、自助抽樣法程式流程圖 作者繪製

(六) 輸出轉移過程中轉移誤差

為了評估迭代時轉移誤差下降程度，我執行1000次隨機矩陣迭代，輸出前300次迭代時每次的矩陣誤差，並以 Excel 作圖。

參、研究結果與討論

一、研究結果

後續之表格由於四捨五入的關係，機率總和可能並非為100%。

(一) **定理2.1** 當移動次數趨近於無限大時，到特定都市的機率趨近於1。

(二) **定理3.1** 當選定了特定城市 n 、每次移動機率固定且任意初始位置與城市 n 連通，則任

意初始位置的移動次數期望值、變異數皆存在，非發散至無窮大。

(三) **定理4.3** 期望值 $E = \sum_{k=0}^{n-1} (P(X_0 = k)E_k)$ ，其中隨機變數 X_i 代表移動 i 次後的位置。初始位置為 l ，即 $P(X_0 = l) = 1$ 的期望值為 E_l ，其中 $l = 0, 1, \dots, (n-1)$ 。

(四) **定理4.4** $E_l = \sum_{m=0}^{n-1} (p_{lm}E_m) + 1, l = 0, 1, \dots, (n-1)$ ，其中 $P(X_i = m | X_{i-1} = l) = p_{lm}$ ，為與 i 無關的常數。

(五) **定理4.12** 變異數 $Var = \sum_{k=0}^{n-1} (P(X_0 = k)(Var_k + (E_k)^2)) - E^2$ 。

(六) **定理4.13** $Var_l = \sum_{k=0}^{n-1} (p_{lk}(Var_k + (E_k)^2) - (E_l - 1)^2), l = 0, 1, \dots, n-1$ 。

(七) 2022年5月感染人數所得之前五適合轉移矩陣：如表八～表十二，其總共執行時間為170分36.626秒，約三小時。

轉移矩陣	北部	中部	南部	東部	離島
北部	0.98	0.00	0.00	0.00	0.00
中部	0.00	0.67	0.27	0.04	0.01
南部	0.00	0.29	0.67	0.00	0.16
東部	0.02	0.04	0.00	0.92	0.06
離島	0.00	0.00	0.06	0.04	0.77
拉格朗日乘數	-0.0042	-0.0036	-0.0043	-0.0004	-0.0022
轉移誤差	0.0912249				

表八、轉移誤差第5小的轉移矩陣、拉格朗日乘數與轉移誤差 作者繪製

轉移矩陣	北部	中部	南部	東部	離島
北部	0.98	0.00	0.00	0.00	0.00
中部	0.00	0.74	0.22	0.03	0.00
南部	0.00	0.23	0.73	0.01	0.13
東部	0.02	0.03	0.00	0.92	0.08
離島	0.00	0.00	0.05	0.04	0.80
拉格朗日乘數	-0.0052	-0.0035	-0.0042	-0.0007	-0.0021
轉移誤差	0.0911748				

表九、轉移誤差第4小的轉移矩陣、拉格朗日乘數與轉移誤差 作者繪製

轉移矩陣	北部	中部	南部	東部	離島
北部	0.98	0.00	0.00	0.00	0.00
中部	0.00	0.72	0.24	0.04	0.00
南部	0.00	0.19	0.76	0.01	0.12
東部	0.02	0.03	0.00	0.92	0.08
離島	0.00	0.06	0.00	0.04	0.80
拉格朗日乘數	-0.0051	-0.0035	-0.0042	-0.0007	-0.0021
轉移誤差	0.0911595				

表十、轉移誤差第3小的轉移矩陣、拉格朗日乘數與轉移誤差 作者繪製

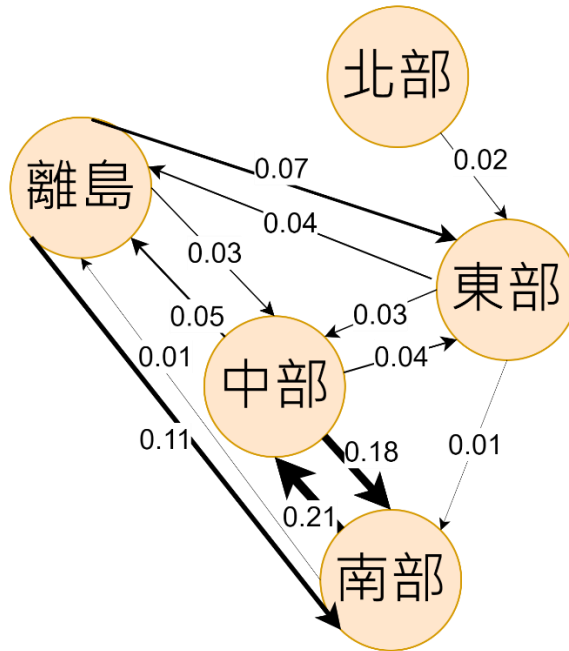
轉移矩陣	北部	中部	南部	東部	離島
北部	0.98	0.00	0.00	0.00	0.00
中部	0.00	0.76	0.19	0.03	0.04
南部	0.00	0.21	0.75	0.01	0.11
東部	0.02	0.04	0.00	0.92	0.07
離島	0.00	0.00	0.06	0.04	0.79
拉格朗日乘數	-0.0052	-0.0035	-0.0042	-0.0007	-0.0022
轉移誤差	0.0911573				

表十一、轉移誤差第2小的轉移矩陣、拉格朗日乘數與轉移誤差 作者繪製

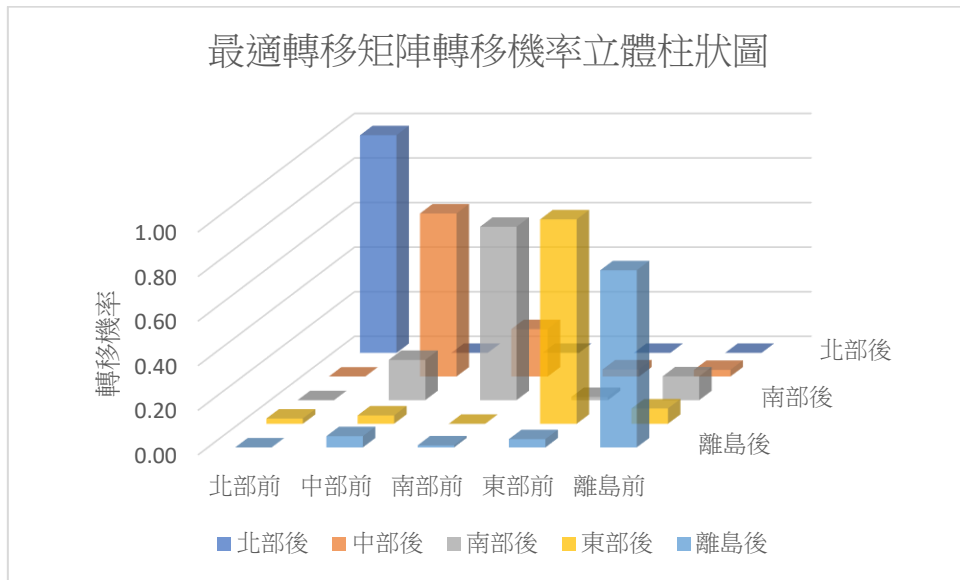
轉移矩陣	北部	中部	南部	東部	離島
北部	0.98	0.00	0.00	0.00	0.00
中部	0.00	0.73	0.21	0.03	0.03
南部	0.00	0.18	0.78	0.01	0.11
東部	0.02	0.04	0.00	0.92	0.07
離島	0.00	0.05	0.01	0.04	0.79
拉格朗日乘數	-0.0051	-0.0035	-0.0042	-0.0007	-0.0022
轉移誤差	0.0911473				

表十二、轉移誤差第1小的轉移矩陣、拉格朗日乘數與轉移誤差 作者繪製

(八) 將轉移誤差第一小轉移矩陣繪圖表示：以圓圈代表區域，箭頭粗細(0.25pt/0.01機率)代表轉移機率。其中轉移到自身的箭頭未畫出。並以3D 柱狀圖表示轉移機率



圖四、5月所得最適轉移矩陣轉移機率示意圖（不含轉移到自身箭頭） 作者繪製



圖五、5月所得最適轉移矩陣轉移機率立體柱狀圖 作者繪製

(九) 轉移天數期望值與穩定狀態計算結果：以上方所求得公式計算轉移矩陣穩定狀態、從區域*j*開始到區域*i*的城市天數期望值為下方第*i*列第*j*行元，例如從中區開始，到達

南部就停止，所花天數的期望值為10天。並將前往每個區域的天數平均

期望值	北部	中部	南部	東部	離島	平均	穩態
北部	0	∞	∞	∞	∞	∞	0.00
中部	70	0	5	20	14	22	0.29
南部	73	10	0	23	14	24	0.32
東部	50	37	42	0	32	32	0.26
離島	78	30	33	28	0	34	0.13

表十三、轉移誤差第1小的轉移矩陣穩定狀態與移動天數期望值 作者繪製

- (十) **轉移天數變異數計算結果**：以上方公式計算轉從區域*j*開始到區域*i*的城市天數變異數，將其開根號列為下方第*i*列第*j*行元，例如從中區開始，到達南部就停止，所花天數的標準差為210天。

轉移期望值	北部	中部	南部	東部	離島
北部	0	∞	∞	∞	∞
中部	2791	0	34	295	210
南部	2880	210	0	377	299
東部	2500	1491	1505	0	1367
離島	3341	934	948	862	0

表十四、轉移誤差第1小的轉移矩陣移動天數標準差 作者繪製

- (十一) **轉移誤差第1小的轉移矩陣對角線上元**：北部>東部>離島≈南部>中部
- (十二) **自助抽樣法所得最適轉移矩陣**：將由自助抽樣法所求得之1000筆轉移矩陣，將各元分別求出標準差、變異數、信賴區間如表十五~十七，並以立體柱狀圖繪出轉移矩陣，如圖六。總共執行時間103分47.628秒，約一個半小時。

轉移機率平均	北部	中部	南部	東部	離島
北部	0.97	0.00	0.00	0.01	0.00
中部	0.00	0.75	0.18	0.03	0.06
南部	0.00	0.18	0.78	0.02	0.11

東部	0.03	0.03	0.00	0.91	0.08
離島	0.00	0.04	0.04	0.04	0.76

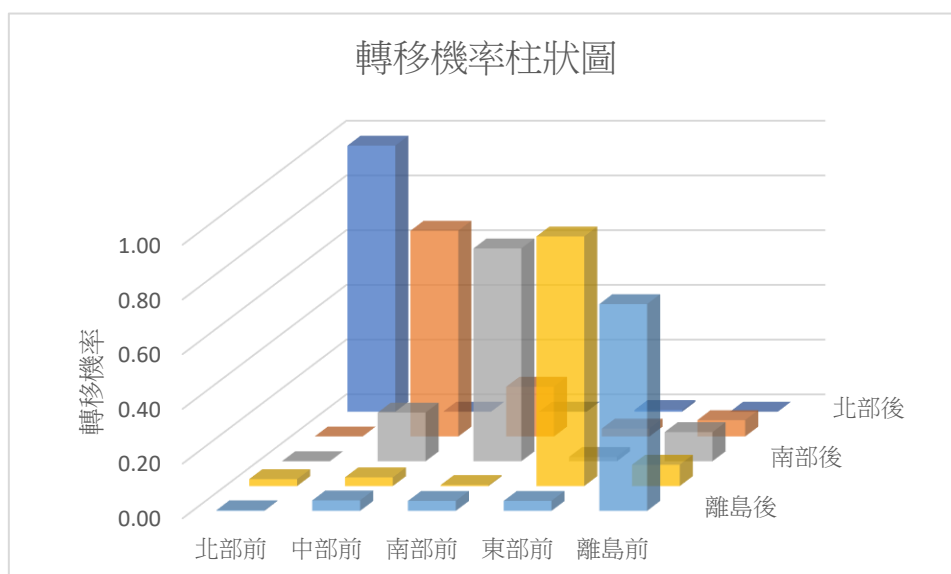
表十五、自助抽樣法求得之矩陣平均值 作者繪製

轉移標準差	北部	中部	南部	東部	離島
北部	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
中部	0.00	0.09	0.08	0.01	0.07
南部	0.00	0.07	0.07	0.01	0.07
東部	0.01	0.03	0.02	0.02	0.08
離島	0.01	0.05	0.05	0.02	0.10

表十六、自助抽樣法求得之矩陣標準差 作者繪製

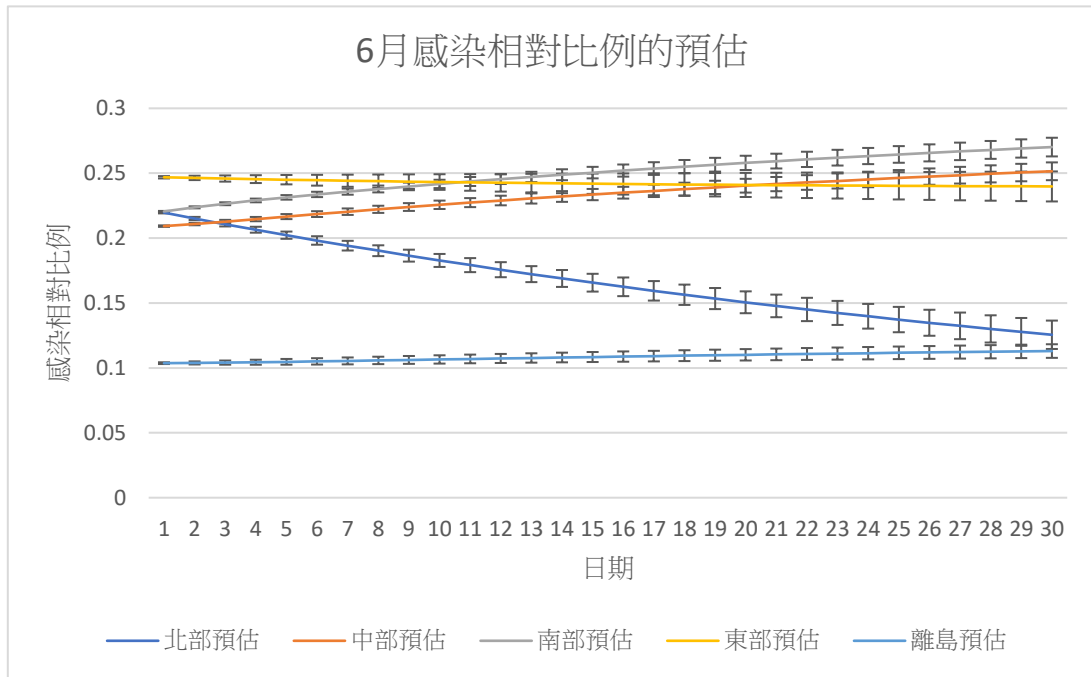
轉移信賴區間	北部	中部	南部	東部	離島
北部	[0.97,0.98]	[0,0]	[0,0]	[0,0.01]	[0,0]
中部	[0,0]	[0.72,0.78]	[0.15,0.21]	[0.02,0.03]	[0.03,0.09]
南部	[0,0]	[0.15,0.20]	[0.75,0.80]	[0.01,0.02]	[0.08,0.13]
東部	[0.02,0.03]	[0.02,0.04]	[0,0.01]	[0.90,0.92]	[0.05,0.11]
離島	[0,0]	[0.02,0.06]	[0.02,0.05]	[0.03,0.04]	[0.72,0.79]

表十七、自助抽樣法求得之矩陣95%信賴區間 作者繪製

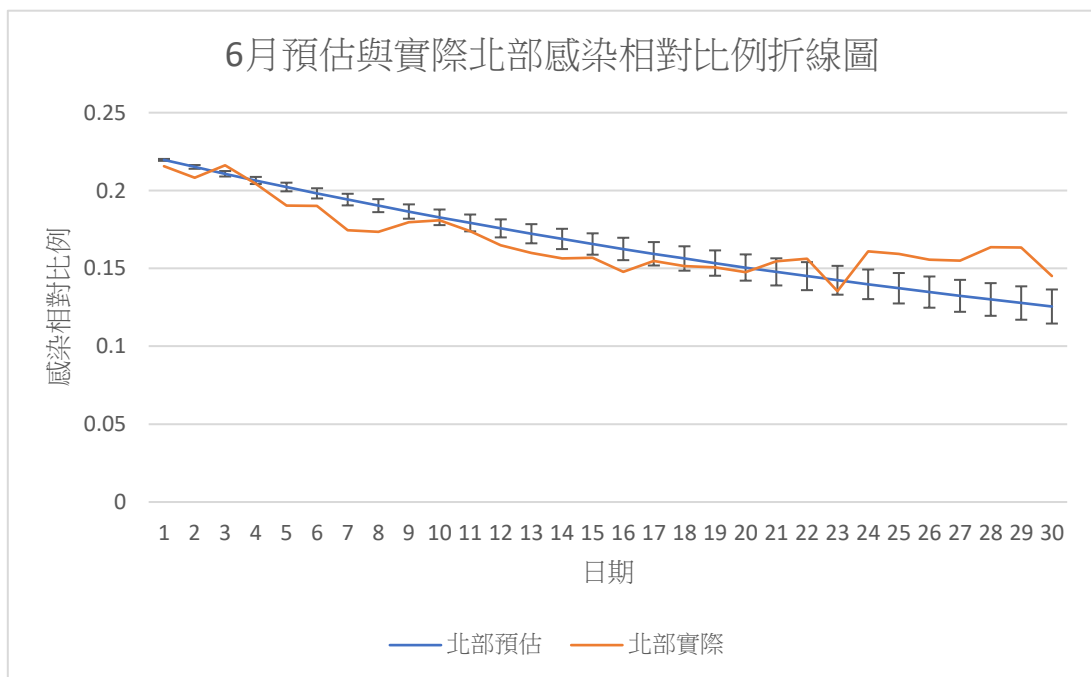


圖六、自助抽樣法所得轉移機率平均立體柱狀圖 作者繪製

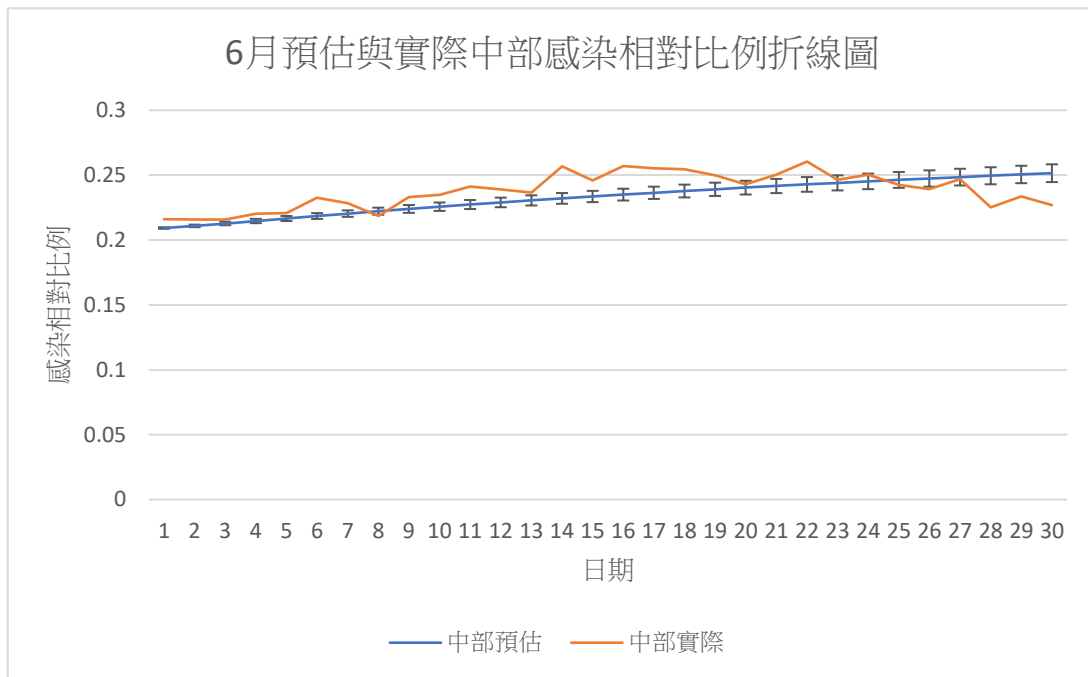
(十三) 六月預估情形：將自助抽樣法所得的1000筆矩陣，以5/31資料進行轉移，得到6/1~6/30的1000筆數據，計算出平均值、標準差信賴區間後，繪出預估的折線圖如圖七。同時，分區將預估數據、實際數據繪圖如圖八~圖十二，並列出相關係數如表十八。



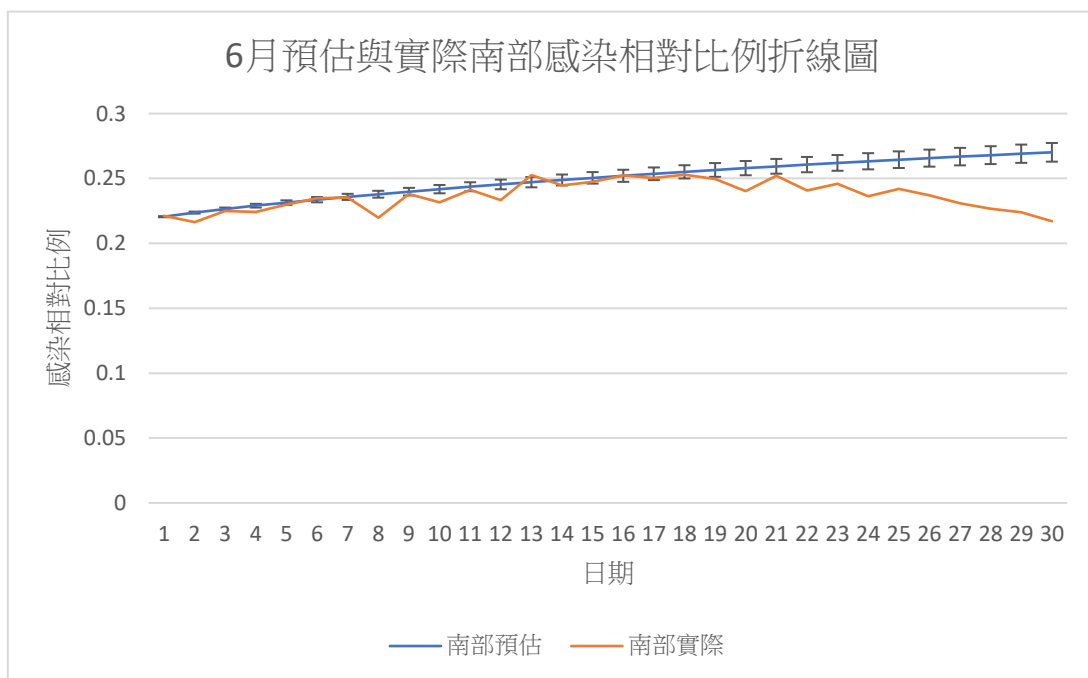
圖七、自助抽樣法所得6月感染相對比例預估(誤差線為95%信賴區間) 作者繪製



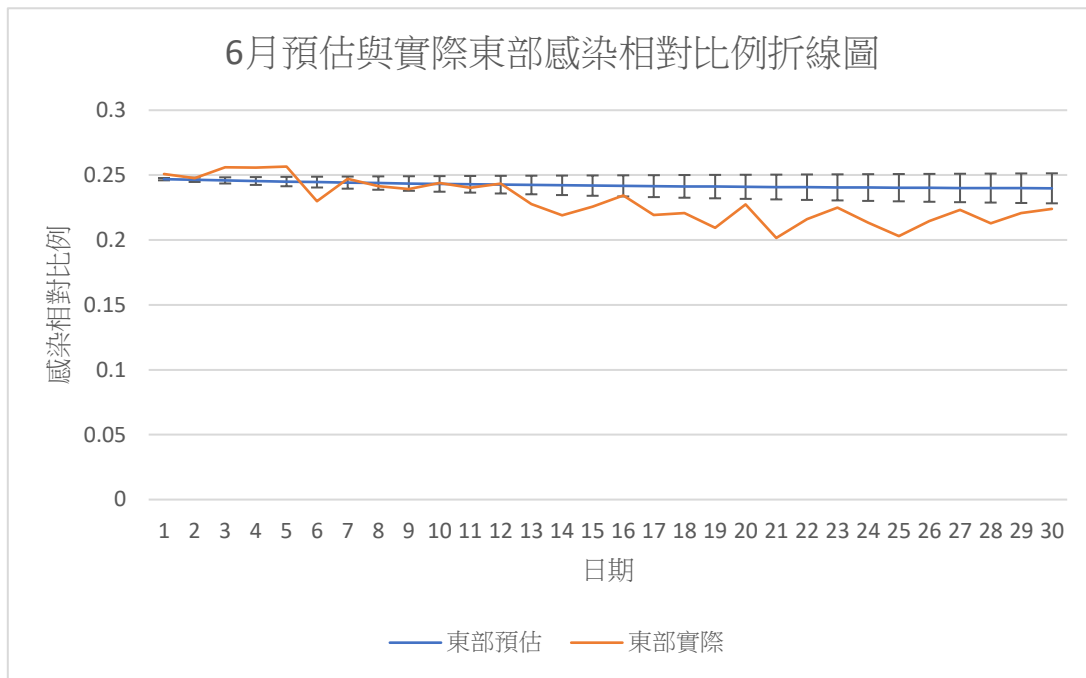
圖八、自助抽樣法所得6月北部感染相對比例預估(誤差線為95%信賴區間) 作者繪製



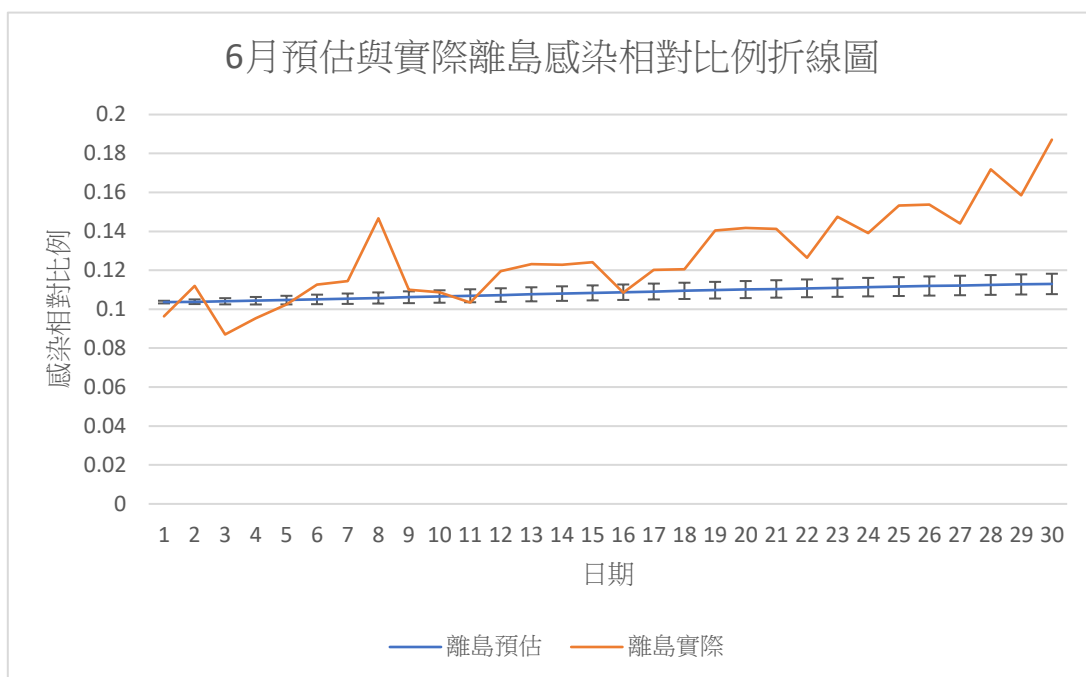
圖九、自助抽樣法所得6月中部感染相對比例預估(誤差線為95%信賴區間) 作者繪製



圖十、自助抽樣法所得6月南部感染相對比例預估(誤差線為95%信賴區間) 作者繪製



圖十一、自助抽樣法所得6月東部感染相對比例預估(誤差線為95%信賴區間) 作者繪製



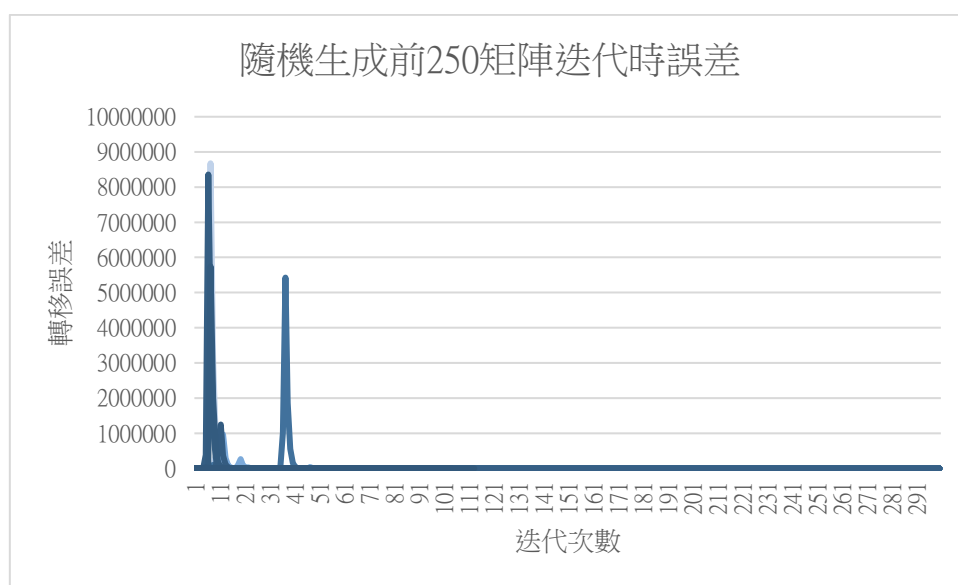
圖十二、自助抽樣法所得6月離島感染相對比例預估(誤差線為95%信賴區間) 作者繪製

預估與實際感染相對比例 的相關係數	6/1~6/30數據 相比	6/1~6/15數據 相比
北部	0.85	0.96

中部	0.60	0.90
南部	0.33	0.84
東部	0.85	0.75
離島	0.85	0.57

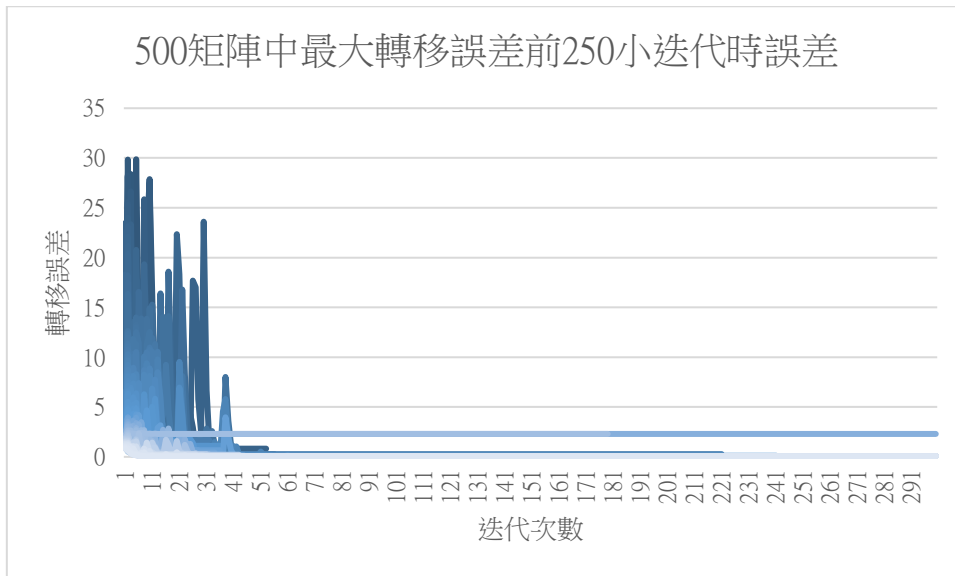
表十八、自助抽樣法所預估之相對比例與真實相對比例相關係數 作者繪製

(十四) **迭代過程中轉移誤差**：讓程式輸出前1000次隨機矩陣迭代(每個隨機矩陣迭代300次，由於 Excel 折線圖只能畫出255條線的緣故，取前250條繪圖如圖十三。



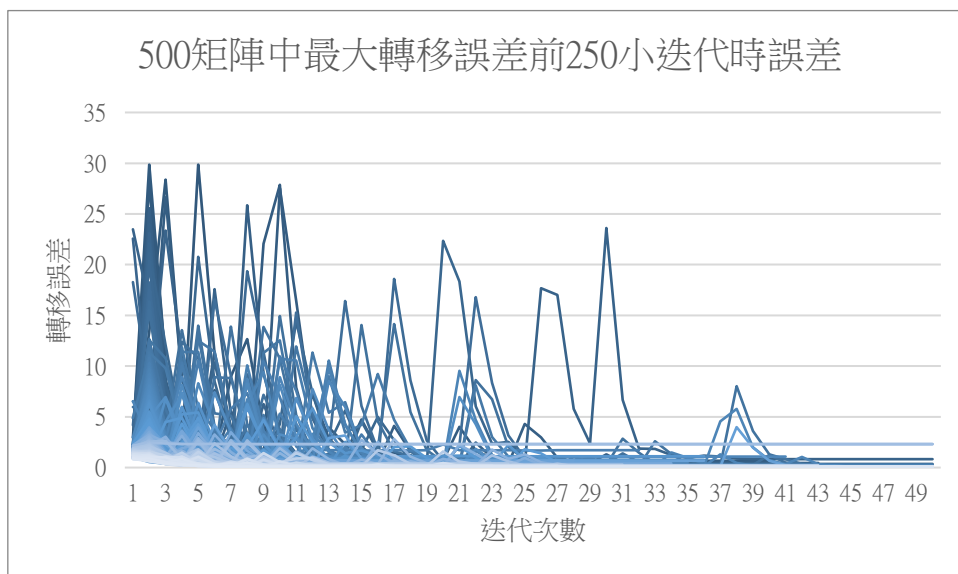
圖十三、隨機生成前250矩陣迭代時轉移誤差折線圖 作者繪製

由於有少數幾條誤差在一瞬間飆高到8,500,000附近，使得座標軸範圍太大、不易閱讀。改取前500條，依據轉移誤差最大值進行排序，選最大值較小的250條，繪成折線圖如圖十四。



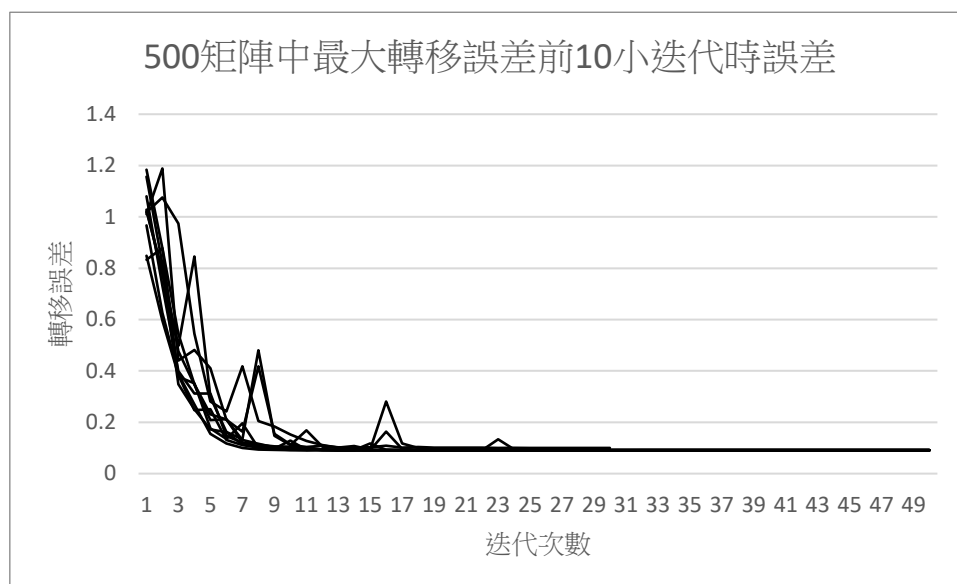
圖十四、隨機生成前500矩陣，最大轉移誤差前250小迭代時轉移誤差折線圖 作者繪製

由於迭代大多於50次左右後，轉移誤差變化不明顯，改以前50次作圖，並將折線條粗細改為1pt(原先2.5pt)，如下圖十五。



圖十五、隨機生成前500矩陣，最大轉移誤差前250小迭代時轉移誤差折線圖 作者繪製

為了清楚理解迭代時的情形，挑選前500組隨機矩陣最大轉移誤差前5小的前50次轉移誤差繪成圖十六



圖十六、隨機生成前500矩陣，最大轉移誤差前5小矩陣迭代時轉移誤差折線圖 作者繪製

二、討論

- (一) **擬合後轉移誤差**：5月資料所得之最適轉移矩陣，轉移誤差為0.0911473。而用相同矩陣，改以6月資料計算轉移誤差，轉移誤差為0.0816735。其誤差相較於原先5月數據甚至更小，因此此模型在評估未來轉移的功效不差。
- (二) **轉移矩陣機率、穩定狀態**：對角線上元北部>東部>離島≈南部>中部，因此推測防疫成效北部最優、中部最低。推測因為北部疫情較早爆發，防疫經驗累積使得當時不易傳出區。而中部位於中心，容易前往北東南離島傳播。然而當時北部相對剛開始傳播的其他區域，疫情逐漸趨緩，5月時感染人數有逐漸減少的趨勢，相對比例下降，因此穩定狀態顯示北部不會有感染病例。
- (三) **轉移矩陣期望值**：由表十三中數據，南部前往中部、中部前往南部以及離島前往中部、南部的期望值較小，而北部前往其他區域期望值較大。顯現出中南部互相傳染，離島會傳給中、南部，而北部防疫效果佳不易傳染。此點也可從圖四中箭頭粗細看出。前往此區域平均日數：北部>離島>東部>南部>中部，因此中部感染風險較大、北部感染風險較小。
- (四) **轉移矩陣標準差**：由表十四中數據，南部前往中部、中部前往南部以及離島、東部

前往中部、南部的標準差皆較小，而北部前往其他區域標準差較大。與期望值的趨勢大致一致。

- (五) **自助抽樣法所得資料**：由自助抽樣法所得之矩陣平均值與直接迭代得到矩陣相去不遠，而95%信賴區間的範圍大多也都在0.05以內。6月預估的感染相對比例也大致上與實際數字吻合，然而大約10~20天後就會逐漸偏離(依不同地區而定)。相關係數在前十五天中，除了離島的各區也都達0.7以上，為高度正相關。離島地區可能因為人口數目較少的緣故，感染相對比例變動較大，導致不易預估的情形。
- (六) **迭代時的轉移誤差**：從圖十三~圖十五中可以發現，迭代時轉移誤差會有一瞬間飆高的高情形，甚至高達數百萬，這應該是因為用反矩陣迭代時，行列式值接近0會導致反矩陣數值不穩定的緣故。而觀察圖十六，可以了解到收斂速度其實蠻快的，轉移誤差迭代不到10次就從1.2降至0.2以下，此處運用牛頓法迭代確實可以成功執行。

肆、結論與應用

一、結論

- (一) 只要初始地點與選定的特定城市 n 連通，移動機率固定且城市有限個，則帶原者必定會到達城市 n 。

- (二) 移動次數的期望值收斂至非無窮大。可藉由解方程式

$$E_l = \sum_{m=0}^{n-1} (p_{lm} E_m) + 1 \quad l = 0, 1, \dots, (n-1)$$
來求出初始位置為 l 的期望值，其中由引理3.2可知此方程式有解且唯一(整理後係數矩陣為 $I - Q$)， p_{lm} 代表從位置 l 前往位置 m 的機率。一般情況下期望值 $E = \sum_{k=0}^{n-1} (P(X_0 = k) E_k)$ 。

- (三) 移動次數的變異數收斂至非無窮大。可藉由解方程式

$$\text{Var}_l = \sum_{k=0}^{n-1} (p_{lk} (\text{Var}_k + (E_k)^2)) - (E_l - 1)^2, \quad l = 0, 1, \dots, n-1$$
來求出初始位置為 l 的變異數，其中由引理3.2可知此方程式有解且唯一(整理後係數矩陣為 $I - Q$)。一般情況下 $\text{Var} = \sum_{k=0}^{n-1} (p_k (\text{Var}_k + (E_k)^2)) - E^2$ ，其中 p_k 代表初始位置 k 的機率。

- (四) 轉移矩陣對角線上元北部>東部>離島≈南部>中部，可知北部防疫較佳，中部較易

傳播到其他區域。

(五) 前往此區域平均日數：北部>離島>東部>南部>中部，因此中部較易被傳播、北部較不易被感染

(六) 利用自助抽樣法獲得標準差後求得信賴區間，範圍大多都在0.05內，此預估的精確度大。

(七) 自助抽樣法所預估的6月數據在前半月都大致吻合，且相關係數除了離島外皆達0.7以上，可用此方法預估半個月後的感染相對比例。

(八) 轉移誤差在迭代時會有一瞬間飆高的情形，但大致而言收斂快速，利用牛頓法迭代運行效率佳。

二、應用

本研究移動模型主要著重在一階馬可夫鍊，其轉移機率只跟當前城市有關。未來可以嘗試推廣到二階馬可夫鍊，轉移機率與當前城市、前一天城市有關。甚至可以大幅推廣，到達n階馬可夫鍊或是連續型馬可夫鍊。

在轉移矩陣的擬合與預估6月情況上，兩者的轉移誤差皆很小，並且利用自助抽樣法所預估隔月感染相對比例變化也大致擬合成功。因此藉由此模型，收集當月的資料獲得轉移矩陣後，可用以評估隔月的情形，並藉由轉移矩陣求得移動天數期望值、標準差，知道哪個城市感染風險較大。同時，隨著資料庫的擴大，不必每次都重新撒點，可以藉由輸入之前已知轉移矩陣，進行初始值迭代。

伍、參考資料

一、周志成（2010年05月10日）。矩陣範數。線代啟示錄。

<https://ccjou.wordpress.com/2010/05/10/%E7%9F%A9%E9%99%A3%E6%A8%A1/>

二、周志成（2010年11月19日）。Jordan形式大解讀(上)。線代啟示錄。

<https://ccjou.wordpress.com/2010/11/10/jordan-%E5%BD%A2%E5%BC%8F%E5%A4%A7%E8%A7%A3%E8%AE%80-%E4%B8%8A/>

三、周志成（2010年12月08日）。收斂矩陣。線代啟示錄。

<https://ccjou.wordpress.com/2010/12/08/%E6%94%B6%E6%96%82%E7%9F%A9%E9%99%A3/>

四、周志成（2012年07月03日）。譜半徑與矩陣範數。線代啟示錄。

<https://ccjou.wordpress.com/2012/07/03/%E8%AD%9C%E5%8D%8A%E5%BE%91%E8%88%87%E7%9F%A9%E9%99%A3%E7%AF%84%E6%95%B8/>

五、周志成（2013年06月03日）。跡數與行列式的導數。線代啟示錄。

<https://ccjou.wordpress.com/2013/06/03/%E8%B7%A1%E6%95%B8%E8%88%87%E8%A1%8C%E5%88%97%E5%BC%8F%E7%9A%84%E5%B0%8E%E6%95%B8/>

六、周志成（2013年07月03日）。牛頓法——非線性方程的求根方法。線代啟示錄。

<https://ccjou.wordpress.com/2013/07/08/%E7%89%9B%E9%A0%93%E6%B3%95%E2%94%80%E2%94%80%E9%9D%9E%E7%B7%9A%E6%80%A7%E6%96%B9%E7%A8%8B%E7%9A%84%E6%B1%82%E6%A0%B9%E6%96%B9%E6%B3%95/>

七、周志成（2017年02月07日）。Karush-Kuhn-Tucker(KKT)條件。線代啟示錄。

<https://ccjou.wordpress.com/2017/02/07/karush-kuhn-tucker-kkt-%E6%A2%9D%E4%BB%B6/>

八、林倉億（2014年08月05日）。「轉移矩陣」二三事(三)：馬可夫鏈穩定狀態的判別。

HPM通訊。<https://math.ntnu.edu.tw/~horng/letter/hpm17078.pdf>

九、Abdelghafour Marfak, Doha Achak, Asmaa Azizi, Chakib Nejjari, Khalid Aboudi, Elmadani Saad, Abderraouf, Ibtissam Youlyouz-Marfak (2020 July 24). The hidden Markov chain modelling of the COVID-19 spreading using Moroccan dataset.

<https://reader.elsevier.com/reader/sd/pii/S2352340920309616?token=D3093BE1EFA3CA4EB8D61AFD1B1B8B70D9A9C19302E076A041F110C98154514767D14BA6C25502FD378E3D9511915A04&originRegion=us-east-1&originCreation=20220926152650>

十、George A. F. Seber (2007). A Matrix Handbook for Statisticians. Wiley-Interscience

十一、 Hung Chen (2004 Sep 03). Bootstrap Method and its validity.

<http://www.math.ntu.edu.tw/~hchen/teaching/LargeSample/notes/notebootstrap.pdf>

十二、 Jorge Luis Romeu (2020 July 17). A Markov Chain Model for Covid-19 Survival Analysis.

<https://web.cortland.edu/matresearch/MarkovChainCovid2020.pdf>

十三、 Lawrence E. Spence, & Arnold. Insel, & Stephen H. Friedberg (2008). Elementary Linear Algebra (2nded.). Pearson FT Press

十四、 Ron Larson, & Bruce H. Edwards (2018). Essential Calculus: Early Transcendental Functions(4thed.). Cengage Learning

十五、 William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery(1993). Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing(2nded.). Cambridge Univ Press

【評語】 010014

本作品假設染疫者均不傳染，儘做城市之間的移動，然後以馬可夫鏈為模型，輔以公佈之感染人數，數據是較早的資料，計算出轉移矩陣，套用一些高等數學工具，進行一些關於馬可夫鏈性質探討。然而此模型假設忽略傳染因素並不合理，這個假設若能以預測未來之感染人數來驗證會讓作品完整許多。