グラフとマルコフ連鎖

松田 修

1 既約行列

既約行列を定義する．

定義1 $A=(a_{ij})$をn次実正方行列とする．
(1) Aのすべての成分a_{ij}が$a_{ij}\geq 0$であるとき，Aを**非負行列**という．
(2) Aを非負行列とする．任意の$1\leq i,j\leq n$に対し，A^mの成分a_{ij}が$a_{ij}>0$となるような自然数mが存在するとき，Aは**既約**である，または**既約行列**であるという．

例1

(1) $A=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$は既約である．なぜならば，$A^2=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 2\end{pmatrix}$となるから．

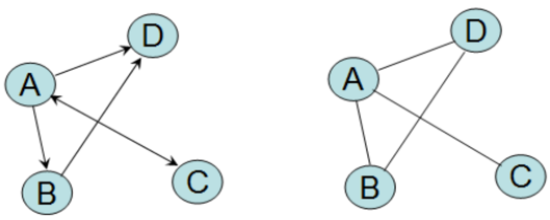
(2) $B=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 0 & 1\end{pmatrix}$は既約ではない．なぜならば，$B^n=\begin{pmatrix}1 & n\\ 0 & 1\end{pmatrix}$となるから．

問1 次の行列は既約かそうでないか判断せよ．

(1) $A=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 1 & 1\end{pmatrix}$　　(2) $A=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$

2 有向グラフ

グラフ（または，**無向グラフ**）とは，頂点と辺により構成された図形のことで，点をノード，辺をエッジと呼ぶ．そして，**有効グラフ**とは，向きをもつエッジにより構成されたグラフのことをさす．



(a) 有向グラフ　　(b) 無向グラフ

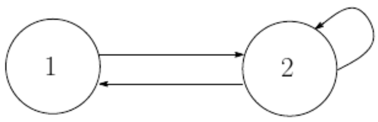
定義2　$A=\left(a_{ij}\right)$をn次実正方行列に対して，$\boldsymbol{A}$**に付随する有効グラフ**$\boldsymbol{G_A}$を以下のように定義する．

（1）G_Aは異なるn個の1番からn番のノードを持つ．

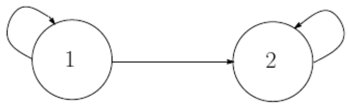
（2）Aの成分a_{ij}が0でないとき，ノードiからノードjに向かう矢印を引く．

例2

（1）$A=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$に付随する有効グラフ$G_A$は



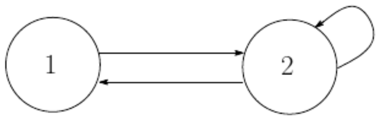
（2）$B=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 0 & 1\end{pmatrix}$は付随する有効グラフ$G_B$は



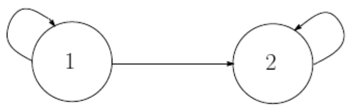
定義3　有効グラフ上の任意の２つのノードiとjに対して，iからjに向かう矢印の列が存在するとき，そのグラフは**強連結**であるという．

例3

（1）以下の有効グラフは強連結である．



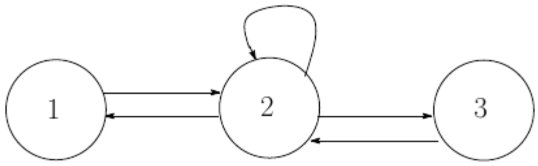
（2）以下の有効グラフは強連結ではない．



定理1　非負なn次正方行列Aが既約であることと，Aに付随する有効グラフG_Aが強連結であることは同値である．

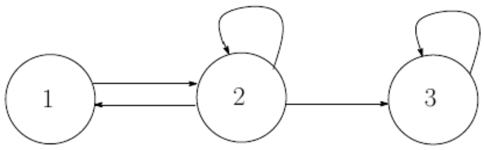
例4

（1） $A=\begin{pmatrix}0&1&0\\3&5&2\\0&1&0\end{pmatrix}$に付随する有効グラフ$G_A$は



より，強連結であるので，Aは既約である．

（2） $B=\begin{pmatrix}0&1&0\\3&5&2\\0&0&1\end{pmatrix}$に付随する有効グラフ$G_B$は



より，強連結でないので，Bは既約ではない．

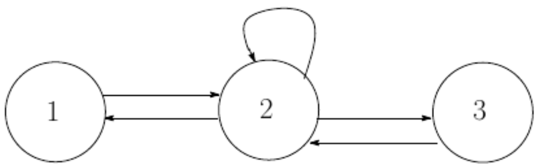
問4 以下の行列A,Bは既約であるかそうでないか，それぞれ判断せよ．

(1) $A=\begin{pmatrix}0&3\\1&0\end{pmatrix}$　　(2) $B=\begin{pmatrix}0&3&2\\1&0&0\\1&0&0\end{pmatrix}$

3 行列の周期

Aを非負なn次正方行列とする．そして，Aに付随する有効グラフG_Aを考える．

たとえば，$A=\begin{pmatrix}0&1&0\\3&5&2\\0&1&0\end{pmatrix}$に付随する有効グラフ$G_A$は



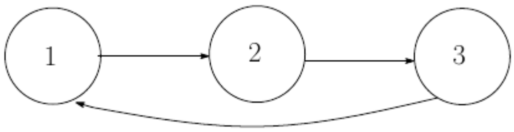
であった．このグラフにおいて，ノード1について考える．1から1へ初めて戻る経路（パス）は$1\to2\to1$で

あり，パスの本数は 2 である．他にも$1 \to 2 \to 3 \to 2 \to 1$がありパスの本数は 4 である．また，$1 \to 2 \to 2 \to 1$のパスの本数は 3 である．そして，ノード1から1へ初めて戻る各パスの本数の最大公約数を，1から1への**周期**といい，$d(1)$と書く．したがって，$d(1) = \gcd(2,4,3) = 1$である．

定義4　一般に，ノードiからi へ初めて戻る各パスの本数の最大公約数を，i からiへの**周期**といい，$d(i)$と書く．

上の有効グラフG_Aにおいては，$d(2) = 1, d(3) = 1$であることがわかる．

$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 3 & 0 & 0 \end{pmatrix}$に付随する有効グラフ$G_C$は



である．明らかに強連結である．さらに，$d(1) = 3$, $d(2) = 3$, $d(3) = 3$である．

実は以下の定理が知られている．

定理2　Aを非負なn次正方行列とする．このとき，Aが既約であるなら，Aに付随する有効グラフG_Aのすべてのノードiの周期$d(i)$は等しい．

定義5　Aを非負なn次正方行列でかつ既約とする．このとき，Aに付随する有効グラフG_Aのあるノードiの周期$d(i)$をAの**周期**といい，$d(A)$で表す．特に$d(A) = 1$であるAは**非振動的**であるという．$d(A) > 1$のときAは**振動的**であるという．

例5

$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 3 & 5 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$は非振動的であり，$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 3 & 0 & 0 \end{pmatrix}$は振動的であり，$C^{3n} = 6^n E$である．

4　極限分布

マルコフ連鎖の極限分布に関するペロン・フロベニウスの定理を紹介する．

定義6　Aを非負なn次正方行列とする．A^mのすべての成分a_{ij}が正となるような自然数mが存在するとき，Aは**原始的**であるという．

次のことが知られている．

定理3　Aを非負なn次正方行列とする．Aは原始的であることと，Aが既約でかつ非振動的であることは同値である．

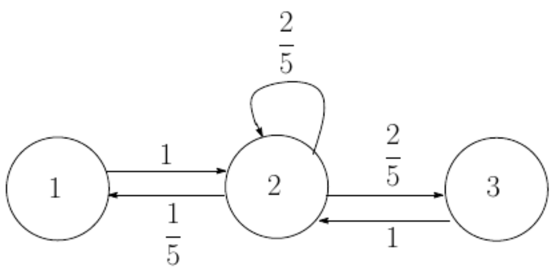
定義7　マルコフ連鎖の推移行列Pに対して，$P^{(\infty)} = \left(p_{ij}^{\infty}\right)$が存在し，$P^{(\infty)}$の各列の成分はすべて同じ値をとり，$p_{11}^{\infty} + p_{12}^{\infty} + p_{13}^{\infty} + \cdots + p_{1n}^{\infty} = 1$であり，さらに$P^{(\infty)}P = P^{(\infty)}$を満たすとき，$P^{(\infty)}$を$P$の**極限分布**という．

定理4（ペロン・フロベニウスの定理）
マルコフ連鎖の推移行列Pが原始的ならば，Pの極限分布$P^{(\infty)}$が存在し，さらに．$P^{(\infty)} = P^{\infty}$が成り立つ．

＊ 以後，Pの極限分布$P^{(\infty)}$をP^{∞}と書く．

例6 マルコフ連鎖の推移行列$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1/5 & 2/5 & 2/5 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$の極限分布$P^{\infty}$が存在することを示し，さらに$P^{\infty}$を求めよ．

（解答）$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1/5 & 2/5 & 2/5 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$に付随する有効グラフ$G_P$が強連結であることは明らかなので，$P$は既約である．



さらに$d(1) = 1$より$d(P) = 1$なので，Pは非振動的である．よって，Pの極限分布P^{∞}が存在する．

$$P^{\infty} = \begin{pmatrix} x & y & z \\ x & y & z \\ x & y & z \end{pmatrix}$$

と置く．$P^{\infty}P = P^{\infty}$より，連立方程式

$$\begin{cases} \dfrac{y}{5} = x \\ x + \dfrac{2}{5}y + z = y \\ \dfrac{2}{5}y = z \end{cases}$$

を得る．よって，$x = t, y = 5t, z = 2t$（tはパラメータ）を得る．$x + y + z = 1$より，

$$x = \frac{1}{8}, y = \frac{5}{8}, z = \frac{1}{4}$$

したがって，

$$P^{\infty} = \begin{pmatrix} 1/8 & 5/8 & 1/4 \\ 1/8 & 5/8 & 1/4 \\ 1/8 & 5/8 & 1/4 \end{pmatrix}$$

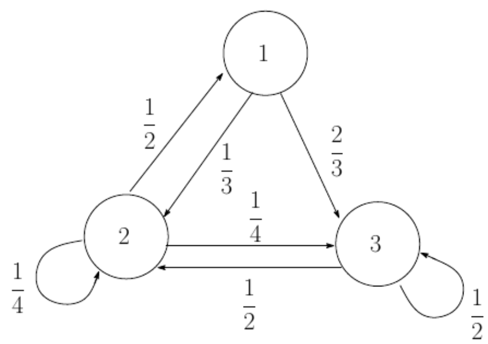
となる．

（補足）Pの極限分布$P^{(\infty)}$が存在することは，Pが原始的，すなわち

$$P^2 = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{5} & \dfrac{2}{5} & \dfrac{2}{5} \\ \dfrac{2}{25} & \dfrac{19}{25} & \dfrac{4}{25} \\ \dfrac{1}{5} & \dfrac{2}{5} & \dfrac{2}{5} \end{pmatrix}$$

であることからもわかる．

問6 以下の有効グラフは，あるマルコフ連鎖の状態推移図である．矢印の近くの数値は，ある情報が単位時間当たりに各ノードから別のノードへ移る確率を意味する．以下の問いに答えよ．



(1) この推移行列Pを求めよ．

(2) Pの極限分布$P^{(\infty)}$が存在することを示せ．

(3) $P^{(\infty)}$を求めよ．