2021/05/07

数学演習IX・X 柳田クラス
第3回 Chapter 3 Random Walks (ランダムウォーク)

柳田 伸太郎

このスライドはNUCTの「リソース」においてあります.

Zoomに自分の苗字と名前の両方が表示されるようにして下さい.

3.1 グラフに付随した確率行列

今回Gと書いたら, 頂点を二つ以上持つ有限グラフ(V, E, φ)であって更に連結, つまり任意の二頂点の間に歩行が存在するものとする.
Gの頂点$u \in V$の次数, つまりuを端点とする辺の数をd_uで表す. また二頂点$u, v \in V$に接続する辺の本数を$\mu_{u,v}$で表す.

定義. Gに付随した確率行列$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{M}(G)$とは, 頂点集合$V$で添え字づけられた正方行列であって, 成分が次で与えられるもののこと.

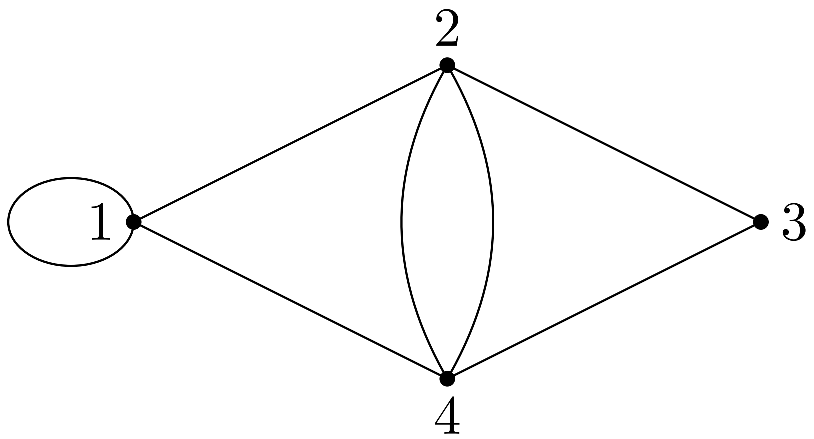
$$\boldsymbol{M}_{u,v} := \frac{\mu_{u,v}}{d_u} \quad (u, v \in V). \tag{3.1.1}$$

頂点$u \in V$に対して次が成立する.

$$0 \leq \boldsymbol{M}_{u,v} \leq 1 \quad (v \in V), \quad \sum_{v \in V} \boldsymbol{M}_{u,v} = 1. \tag{3.1.2}$$

これから$\boldsymbol{M}$がG上のランダムウォークの遷移確率を与えることが分かる.
(ある時点で頂点uにある状態が次の時点で頂点vに遷移する確率を$\boldsymbol{M}_{u,v}$とする.)
隣接行列の冪の意味 (初回の定理1.1) を思い出すと, $\ell \in \mathbb{N}$に対して $(\boldsymbol{M}^{\ell})_{u,v}$ は頂点uからvへℓステップで到達する確率を表すことが分かる.

例. (3.1.2) の $0 \leq \boldsymbol{M}_{u,v} \leq 1$, $\sum_{v \in V} \boldsymbol{M}_{u,v} = 1$ が成立していることに注意する.



$$\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 0 \end{bmatrix}$$

図3.1　連結グラフ G_3 とその確率行列 M

定義. グラフが**次数 d の正則グラフ**であるとは, 任意の頂点 $u \in V$ に対して $d_u = d$ である, つまり各頂点に d 個の辺が接続しているもののことをいう.

次数 d の正則グラフ G に対して, 隣接行列 $\boldsymbol{A}$ と確率行列 M は $\boldsymbol{M} = \frac{1}{d}\boldsymbol{A}$ を満たす. 特に両者の固有ベクトルは一致し, 固有値は次の関係にある:

$$\lambda_u(\boldsymbol{M}) = \frac{1}{d}\lambda_u(\boldsymbol{A}) \quad (u \in V). \tag{3.1.3}$$

例 3.1. 前回導入した立方体グラフ C_n を思い出そう．その頂点集合は $\mathbb{Z}_2^n$ であった．C_n は次数 n の正則グラフである．前回計算した $A(C_n)$ の固有値から

$$\lambda_u(\boldsymbol{M}(C_n)) = \frac{1}{n}\big(n - 2\omega(u)\big) \quad (u \in \mathbb{Z}_2^n), \tag{3.1.4}$$

ここで $\omega(u)$ は頂点 $u \in \mathbb{Z}_2^n$ の成分 1 の数を表す．また $\boldsymbol{A}(C_n)^\ell$ の対角成分の計算から

$$(\boldsymbol{M}(C_n)^\ell)_{u,u} = \frac{1}{2^n n^\ell}\sum_{i=0}^{n}\binom{n}{i}(n-2i)^\ell. \tag{3.1.5}$$

発表用問題 3.1. 立方体グラフ C_n の頂点 $u = (u_1, \ldots, u_n) \in \mathbb{Z}_2^n$ の成分の総和 $|u| := u_1 + \cdots + u_n$ に注目し，また $\boldsymbol{M}(C_n)^\ell$ の確率論的な意味を考えることで，ℓ が奇数ならば $(\boldsymbol{M}(C_n)^\ell)_{u,u} = 0$ となることを示せ．

式 (3.1.5) から直接 $(\boldsymbol{M}(C_n)^\ell)_{u,u} = 0$ を示すことはレポート問題 3 とする．
一般のグラフ G に対する確率行列 $\boldsymbol{M}$ の性質を一つ紹介しよう．$\boldsymbol{M}$ は隣接行列 $\boldsymbol{A}$ と違って対称行列ではないが，次が成立する:

定理 3.2. 頂点を二つ以上持つ連結有限グラフ G の確率行列 $\boldsymbol{M}$ は対角化可能であり，固有値は全て実数である．

3.2　到達時刻

前副節と同様, グラフと言ったら頂点を二つ以上持つ連結有限グラフのことを意味する.

定義. グラフ G 上のランダムウォークを考える. G の二頂点 u, v に対し, u から出発して n ステップ後に初めて v に到達する確率を p_n とする. この時 u から v への到達時刻 (access time, hitting time) $H(u, v)$ を次で定義する.

$$H(u, v) := \sum_{n \geq 1} n p_n. \tag{3.2.1}$$

グラフ G に付随する確率行列 M で遷移確率が与えられるランダムウォークの場合, 到達時刻は次の定理 3.4 ように表せる.
G の頂点の数を $p := |V|$ と書く. また各頂点 $v \in V$ に対し, M から v 行と v 列を除いた行列を $M[v]$ と書く. そして $T[v]$ を, $V \setminus \{v\}$ で添え字づけられる長さ $p-1$ の列ベクトルであって成分が

$$T[v]_u = \frac{\mu_{u,v}}{d_u} \quad (u \in V \setminus \{v\}) \tag{3.2.2}$$

で与えられるものとする. M の定義 (3.1.1) と比較すると, $T[v]$ は M の v 列目の列ベクトルから v 行目の成分を除いたものだと分かる.

定理 3.4. 行列 $I_{p-1} - \boldsymbol{M}[v]$ は可逆であり,

$$H(u,v) = \left((I_{p-1} - \boldsymbol{M}[v])^{-2} T[v]\right)_u. \tag{3.2.3}$$

例 3.5. 図 3.1 のグラフ G_3 について, $v = v_4$ として定理 3.4 に現れる行列を計算すると

$$\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{M}[v_4] = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}, \quad I_3 - \boldsymbol{M}[v_4] = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & \frac{-1}{3} & 0 \\ \frac{-1}{4} & 1 & \frac{-1}{4} \\ 0 & \frac{-1}{2} & 1 \end{bmatrix}.$$

すると $\det(I_3 - \boldsymbol{M}[v_4]) = 1/2$ となって確かに $I_3 - \boldsymbol{M}[v_4]$ は可逆. 更に計算を進めると

$$(I_3 - \boldsymbol{M}[v_4])^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{7}{4} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{2} & \frac{4}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} & \frac{2}{3} & \frac{7}{6} \end{bmatrix}, \quad (I_3 - \boldsymbol{M}[v_4])^{-2} = \begin{bmatrix} \frac{55}{16} & \frac{13}{6} & \frac{17}{24} \\ \frac{13}{8} & \frac{7}{3} & \frac{11}{12} \\ \frac{17}{16} & \frac{11}{6} & \frac{13}{8} \end{bmatrix}, \quad T[v_4] = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

となるので, 定理 3.4 から

$$\begin{bmatrix} H(v_1, v_4) \\ H(v_2, v_4) \\ H(v_3, v_4) \end{bmatrix} = (I_3 - \boldsymbol{M}[v_4])^{-2} T[v_4] = \begin{bmatrix} \frac{31}{12} \\ \frac{13}{6} \\ \frac{25}{12} \end{bmatrix}.$$

3.3　定理 3.4の証明

では定理 3.4の証明を始めよう．証明は三つのステップに分かれる．ステップ1と2で $I_{p-1} - \boldsymbol{M}[v]$ の可逆性を示し，ステップ3で到達時刻の公式(3.2.3)を示す．

定理 *3.4*の証明，ステップ*1.* $I_{p-1} - \boldsymbol{M}[v]$ の可逆性を証明する為に，より一般に，対角化可能な (複素数値) r 次正方行列 B であって，その固有値 $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$ が $|\lambda_j| < 1$ を満たす場合に，$I - B = I_r - B$ が可逆であることを示す．次のステップ2で $\boldsymbol{M}[v]$ がこの条件を満たすことを示す．(以下省略) □

定理 *3.4*の証明，ステップ*2.* まず $\boldsymbol{M}[v]$ が対角化可能であることを示そう．G から頂点 v とそれに接続する辺を除いたグラフ $G - v$ を考え，その連結成分を $H_1, \ldots, H_m$ とする (図 3.2参照)．$G - v$ の連結成分 $H_1, \ldots, H_m$ の順番に G の頂点を番号付ければ，$\boldsymbol{M}[v]$ は次の形のブロック対角行列になる:

$$\boldsymbol{M}[v] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{N}_1 & O & \cdots & O \\ O & \boldsymbol{N}_2 & \cdots & O \\ & & \ddots & \\ O & O & \cdots & \boldsymbol{N}_m \end{bmatrix}. \tag{3.3.3}$$

各 $\boldsymbol{N}_r$ は，H_r が一点からなる場合は 0，二点以上からなる場合は確率行列 $\boldsymbol{M}(H_r)$ である．定理 3.2より後者は対角化可能だから，$\boldsymbol{M}[v]$ が対角化可能であることが分かった．

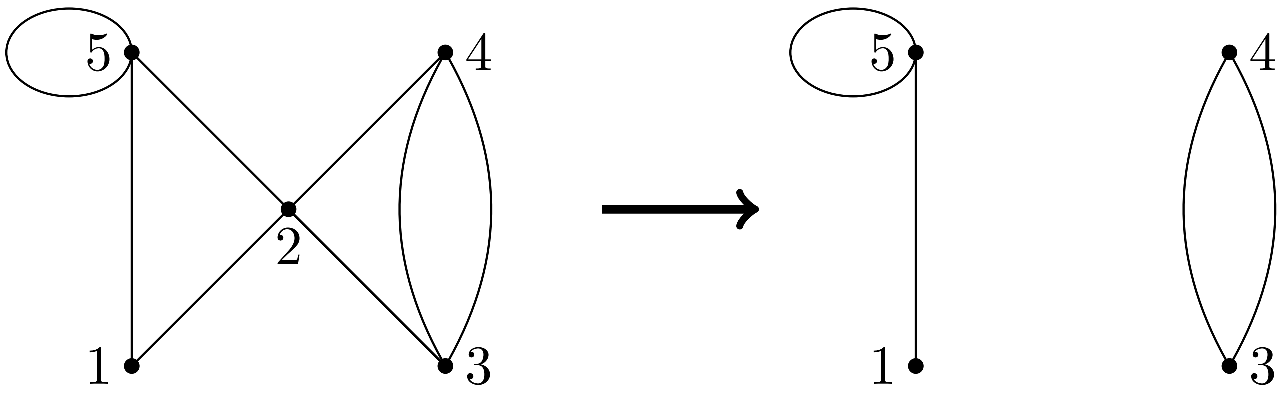


図3.2　連結グラフから頂点2を除いたグラフの連結成分

次にMの固有値の絶対値が1未満であることを示す．(3.3.3)より各$\boldsymbol{N}_r$の固有値を考えればよいが，H_rが二点以上からなる連結グラフである場合，つまり$\boldsymbol{N}_r = \boldsymbol{M}(H_r)$の場合だけ扱えばよい．この場合は$\boldsymbol{N}_r$は既約，つまり，任意の置換行列$P$に対して$P\boldsymbol{N}_rP^{-1}$はブロック三角行列ではない (問題 2)．ここで:

事実 3.3 (Perron-Frobeniusの定理)**.** Bを非負実数成分の既約正方行列とし，ρをBの固有値であって絶対値が最大であるものの一つとする．この時ρは正の実数であり，重複度は1で，更にρの固有ベクトルであって全ての成分が正の実数であるものが存在する．

よって確率行列$\boldsymbol{N}_r = \boldsymbol{M}(H_r)$の実固有値$\rho_r > 0$があって，全ての固有値$\lambda$が$|\lambda| \leq \rho_r$を満たす．後は行の固有ベクトルを用いた計算で$\rho_r < 1$が示せる (詳細略)．　□

最後に定理 3.4の後半，つまり到達時刻$H(u,v)$の公式を導出しよう:

$$H(u,v)=\left((I_{p-1}-\boldsymbol{M}[v])^{-2}T[v]\right)_u.$$

定理 *3.4*の証明，ステップ*3.* 連結グラフG上のランダムウォークについて，頂点uから出発して頂点vを一度も通らずにnステップ後に頂点wに到達する確率は$(\boldsymbol{M}[v]^n)_{u,w}$. wから1ステップでvに到達する確率は$\mu_{w,v}/d_w$だから，到達時刻の定義から

$$H(u,v)=\sum_{w\neq v}\sum_{n\geq 0}(n+1)\frac{\mu_{w,v}}{d_w}(\boldsymbol{M}[v]^n)_{u,w}=\sum_{w\neq v}\frac{\mu_{w,v}}{d_w}\sum_{n\geq 0}(n+1)(\boldsymbol{M}[v]^n)_{u,w}. \tag{3.3.6}$$

ところで，全ての固有値の絶対値が1未満である可逆正方行列Bに対して

$$(I-B)^{-2}=\sum_{n\geq 0}(n+1)B^n \tag{3.3.7}$$

が示せる (問題 5)． これと(3.3.6)及び列ベクトル$T[v]$の定義から

$$H(u,v)=\sum_{w\neq v}\frac{\mu_{w,v}}{d_w}(I_{p-1}-\boldsymbol{M}[v]^n)_{u,w}=\left((I_{p-1}-\boldsymbol{M}[v]^n)T[v]\right)_u.$$

□

レポート問題3 & 次回について

全般的な注意

- 講義ノートのp.20にレポート問題3があります.
  締切は5/14の13時です. NUCTで提出して下さい.
- スマートフォン等でスキャンしたレポートは, PDFに変換して頂けると助かります.
  変換方法はNUCT「リソース」の「スキャンファイルのPDF変換.pdf」参照.

次回について.

- 次回は5/14 (金)です.
  一コマ目 (09:30–10:30) は講義ノート§4 Sperner性を説明します.
  二コマ目 (10:45–11:45) は今回説明した§3 の発表用問題について,
  希望者に解答を発表してもらいます.

一コマ目はここまでです.