Som avslutning på kursen ska vi knyta samman linjär algebra med grafteori och sannolikhetsteori från första kursen. Resultatet blir så kallade slumpvandringar
på grafer och ett (av många) exempel på tillämpningar är sökmotorer på internet.

Grafer och grannmatriser

Låt $G = (V, E)$ vara en graf, där $V = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ är noderna och E är kanterna. Påminner om att kanterna består av oordnade par av element i V, d v s 2-delmängder av V. För att arbeta effektivt med en graf så är det praktiskt att representera den med den så kallade **grannmatrisen** $A = A(G)$. Denna har storlek $n \times n$ och elementen är

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{om } \{v_i, v_j\} \in E \\ 0 & \text{annars.} \end{cases}$$

Med andra ord så är $a_{ij} = 1$ om och endast om det finns kant mellan nod i och nod j. Observera att grannmatrisen är symmetrisk, eftersom om det finns kant mellan i och j så finns det ju (samma) kant mellan j och i. Det kommer också att bara vara nollor på diagonalen, eftersom vi inte tillåter kanter till sig själv.
Nu kan man med hjälp av enkla matrisoperationer få en hel del information om grafen G. Om vi t ex beräknar A^2 så kommer denna att ge antalet vägar av längd 2 mellan olika noder. Ty om $B = A^2$ så gäller att

$$b_{ij} = \sum_{i=1}^{n} a_{ik} a_{kj}$$

och $a_{ik} a_{kj} = 1$ om och endast om det finns en kant från nod i till nod j och en från nod j till nod k, d v s en väg av längd 2 från nod i till nod j.
Med hjälp av induktion kan man utan problem visa följande generalisering:

Sats 1 *Låt A vara grannmatrisen till en graf G. Då gäller att element (i, j) i A^k ger antalet vägar av längd k från nod i till nod j.*

Som en direkt följd till detta så får man

Sats 2 *Det finns en väg mellan nod i och nod j om och endast om det för något $k \geq 1$
gäller att element (i, j) i matrisen A^k är större än noll.*

Hur högt k måste man ta i förra satsen? Kan det bli hur stort som helst? Svaret är att man kan ta $k < n$ och det får vi av följande enkla satser. Vi påminner om att en väg är enkel om den bara passerar varje nod högst en gång.

Sats 3 *Om det finns en väg mellan två noder så finns det en enkel väg mellan dem.*

Bevis. Om den givna vägen inte är enkel så innehåller den en cykel:

$$\{v_i, v_{i+1}, \ldots, v_k, v_i\}.$$

Denna kan man nu ta bort förutom det första elemtet v_i och vi har en kortare väg med minst en mindre dublett. Detta kan man nu fortsätta med tills alla cykler är eliminerade och då har vi en enkel väg. □

Sats 4 *Varje enkel väg i en graf med n noder är av längd högst $n-1$.*

Bevis. Eftersom den bara kan innehålla varje nod en gång så blir antalet kanter högst antal noder minus ett. □

Kombinerar vi nu dessa satser så får vi följande kriterium på att det finns en väg mellan två noder:

Sats 5 *Det finns en väg mellan nod i och nod j om och endast element (i, j) i matrisen*

$$B = \sum_{k=1}^{n-1} A^k$$

är större än noll.

Bevis. Element (i, j) i matrisen B ger enligt Sats 1 antalet vägar av längd högst $n-1$ mellan nod i och nod j. Därmed är element (i, j) i B positivt om och endast om det finns väg av längd högst $n-1$. Men enligt de två senaste satserna ovan så finns det en väg mellan nod i och j om och endast om det finns en väg av längd högst $n-1$ mellan dem. Därmed är beviset klart. □

Som en direkt följd så får vi följande kriterium på att en graf är sammanhängande, d v s att det finns en väg mellan varje par av noder.

Sats 6 *En graf med grannmatris A är sammanhängande om och endast om alla element i*

$$B = \sum_{k=1}^{n-1} A^k$$

är större än noll.

Den diskussion som vi genomfört för grafer fungerar precis lika bra för riktade grafer, d v s grafer där kanterna består av *ordnade* par av noder. En skillnad i detta fall är att matrisen inte behöver bli symmetrisk, eftersom det kan finnas kanter i bara en riktning ("enkelriktade gator"). Dessutom kan man tänka sig att ha loopar, d v s en kant från en nod till sig själv. För matrisen betyder detta att elementen på diagonalen inte behöver vara 0.
Alla satserna ovan gäller också för riktade grafer om man i sista satsen byter ut 'sammanhängande´ mot 'starkt sammanhängande´, d v s att det finns väg från varje nod till varje annan nod (alltså i båda riktningarna).

Slumpvandringar på grafer

En intressant idé med många tillämpningar är så kallade slumpvandringar på grafer. Antag att vi har en graf G och låt $d(v)$ vara graden för noden v, d v s antalet grannar till v. Då låter vi slumpvandring på denna graf vara följande process: Om vi är i en nod v så beger vi oss sedan till någon av dess grannar med lika stor sannolikhet, d v s med sannolikheten $1/d(v)$.
Det finns nu massor av intressanta frågor att ställa sig som är relevanta i olika sammanhang. Vi ska här främst svara på en av de viktigaste nämligen: Vad är sannolikheten att man är i en given nod vid en given tidpunkt? Men innan vi ger oss på denna fråga ska vi undersöka hur man kan använda sig av matriser för att studera slumpvandringen.
Från grannmatrisen A till grafen kan man nu definiera den så kallade **övergångsmatrisen** M för slumpvandringen genom

$$m_{ij} = a_{ij} / \sum_{k=1}^{n} a_{ik}.$$

Med andra ord så normerar man varje rad så att summan av dem är 1. En matris som uppfyller detta (eller ofta dess transponat) brukar kallas för en **stokastisk matris**.

Exempel 1 *Om G är en graf med grannmatrisen*

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

så ges övergångsmatrisen av

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0.25 & 0.25 & 0.25 & 0.25 & 0 \\ 0.25 & 0 & 0.25 & 0.25 & 0.25 & 0 \\ 0.25 & 0.25 & 0 & 0.25 & 0 & 0.25 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0 & 0.2 & 0.2 \\ 0.25 & 0.25 & 0 & 0.25 & 0 & 0.25 \\ 0 & 0 & 0.3333 & 0.3333 & 0.3333 & 0 \end{pmatrix}$$

Vi ska beskriva den nod vi befinner oss i med hjälp av en radvektor som vi kallar **fördelningsvektorn**. Antag att vi som i exemplet har 6 noder. Då betyder t ex fördelningsvektorn $(1\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0)$ att vi (garanterat) befinner oss i första noden. Men vi ska också tillåta oss att vi befinner oss i de olika noderna med en viss sannolikhet. Detta är naturligt eftersom vi oftast redan efter ett steg inte längre exakt kan veta var vi kommer att befinna oss. Fördelningsvektorn $(\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ 0\ 0\ 0)$ betyder t ex att vi befinner oss i någon av de tre första noderna med samma sannolikhet $1/3$. Det enda vi kräver är givetvis att summan av elementen i fördelningsvektorn är 1.
Med hjälp av övergångsmatrisen kan man nu studera slumpvandringen. Vi anmärker först att element (i, j) i övergångsmatrisen är per definition sannolikheten att man går till nod j givet att man är i nod i. Med samma resonemng som för potenser av grannmatrisen så får man följande resultat:

Sats 7 *Element* (i,j) *i matrisen* M^k *är sannolikheten att man befinner sig i nod* j *efter* k *steg givet att man startar i nod* i*. Om* $\mathbf{x}^t$ *är den fördelningsvektor som beskriver var vi befann oss från början, så beskriver* $\mathbf{x}^t M^k$ *var vi befinner oss efter* k *steg.*

Anmärkning 1 *Observera att vi multiplicerar med fördelningsvektorn (som är en radvektor) från vänster. Men om man transponerar så får man istället* $M^t\mathbf{x}$.

Exempel 2 *Först tittar vi på den lilla grafen med bara två noder och en kant mellan dessa. Denna har grannmatris och övergångsmatris lika med*

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

För denna får vi att $M^k = M$ *om* k *är udda och att den är identitetsmatrisen om* k *är jämnt. Här ser vi en periodisitet som innebär att efter jämnt antal steg är man där man började och efter udda antal steg är man i den andra noden. Om vi däremot startar med fördelningsvektorn* $\mathbf{x}^t = (1/2\ 1/2)$*, d v s med lika stor sannolikhet i endera av noderna, så blir*

$$\mathbf{x}^t M^k = \mathbf{x}^t$$

oavsett vad k *är så sannolikheten att vara i en någon av noderna i ett givet steg är* $1/2$.

Exempel 3

$$M^{1000} = \begin{pmatrix} 0.1667 & 0.1667 & 0.1667 & 0.2083 & 0.1667 & 0.125 \\ 0.1667 & 0.1667 & 0.1667 & 0.2083 & 0.1667 & 0.125 \\ 0.1667 & 0.1667 & 0.1667 & 0.2083 & 0.1667 & 0.125 \\ 0.1667 & 0.1667 & 0.1667 & 0.2083 & 0.1667 & 0.125 \\ 0.1667 & 0.1667 & 0.1667 & 0.2083 & 0.1667 & 0.125 \\ 0.1667 & 0.1667 & 0.1667 & 0.2083 & 0.1667 & 0.125 \end{pmatrix}$$

Vi ser att kolumnerna är (i stort sett) konstanta, d v s chansen att vara i en given nod efter 1000 *steg är (i stort sett) oberoende av var man startade. T ex tycks sannolikheten att vi är i första noden vara* $1/6$.

Den fördelning efter "lång tid" som vi fick i sista exemplet kallas för den **stationära fördelningen**. Vi såg däremot i det första exemplet att vi inte fick någon stationär fördelning (förutom i det fall då vi startade med $\mathbf{x}^t = (1/2\ 1/2)$) utan att den växlade mellan två olika matriser. Detta fenomen får man om man utgår från en så kallad tvådelad graf:

Definition 1 *En graf* $G = (V,E)$ *säges vara* **tvådelad** *om det finns delmängder* $A \neq \emptyset$ *och* $B \neq \emptyset$ *av noder sådana att* $A \cup B = V$ *och alla kanter i* E *går mellan en nod i* A *och en i* B*. Det finns alltså inga kanter inom* A *eller inom* B.

Beviset av följande viktiga sats ligger utanför kursen:

Sats 8 *Låt G vara en graf med övergångsmatris M. Antag att G är sammanhängande och att den inte är tvådelad. Då finns en unik stationär fördelning $\mathbf{x}^t$ sådan att*

$$\mathbf{x}^t = \mathbf{x}^t M.$$

Genom att transponera så får man som ovan att

$$\mathbf{x} = M^t \mathbf{x}$$

så $\mathbf{x}$ är alltså en egenvektor till M^t med egenvärdet 1.
Det finns en elementär formel för den stationära fördelningen och beviset är tämligen enkelt:

Sats 9 *Låt $G = (V, E)$ vara en graf som är sammanhängande och ej tvådelad och betrakta motsvarande slumpvandring med övergångsmatris M. Antag att $\mathbf{x}^t$ är den stationära fördelningen och att $|E| = m$. Då gäller att*

$$x_i = \frac{d(v_i)}{2m},$$

där x_i är element i i fördelningsvektorn $\mathbf{x}^t$.

Bevis. Vi ska visa att $\mathbf{x}^t = \mathbf{x}^t M$ om $x_i = d(v_i)/2m$ för alla i. Med andra ord så ska vi visa att

$$(\mathbf{x}^t M)_i = x_i = \frac{d(v_i)}{2m},$$

för alla i. Men

$$(\mathbf{x}^t M)_i = \sum_{k=1}^{n} x_k M_{ki} = \sum_{\{v_k, v_i\} \in E} \frac{d(v_k)}{2m} \cdot \frac{1}{d(v_k)} = \sum_{\{v_k, v_i\} \in E} \frac{1}{2m} = \frac{d(v_i)}{2m},$$

vilket var precis vad vi ville visa. Den sista likheten följer av det faktum att antalet kanter $\{v_k, v_i\} \in E$ (för alla möjliga k) är antalet grannar till v_i. $\square$

Exempel 4 *Vi återgår till exemplet som vi tittade på ovan. Vi har där att $d(v_1) = d(v_2) = d(v_3) = d(v_5) = 4$, $d(v_4) = 5$ och $d(v_6) = 3$. Totala antalet kanter är $(4 \cdot 4 + 5 + 3)/2 = 12$. Från satsen ovan så ser vi att den stationära fördelningen är*

$$(\frac{4}{24}\ \frac{4}{24}\ \frac{4}{24}\ \frac{5}{24}\ \frac{4}{24}\ \frac{3}{24}) = (\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{5}{24}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{8})$$

vilket (givetvis) stämmer med den fördelning vi fann när vi tog en hög potens av övergångsmatrisen.

Man kan studera slumpvandringar också på riktade grafer (t ex gör man detta när man modellerar "webben" med en graf). Man får liknande resultat som de vi fick för vanliga grafer.

Markov-kedjor

En generalisering av de slumpvandringar på grafer som vi studerade ovan är att man helt enkelt frångår principen att varje kant ut från en nod ska ha samma sannolikhet att väljas. Det man får då brukar kallas för en Markov-kedja. Till en Markov-kedja får man alltså en övergångsmatris där precis som innan summan av raderna är 1. Nu behöver dock inte alla element i en rad var lika stora. Vi anmärker att också slumpvandring på en riktad graf är ett specialfall av begreppet Markov-kedja.

Exempel 5 *Betrakta matrisen*

$$\begin{pmatrix} 1/6 & 1/3 & 1/2 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/3 & 1/6 \end{pmatrix}.$$

Summan av varje rad är 1 *så detta är en övergångsmatris för en Markov-kedja. T ex har vi att sannolikheten att vi går från nod* 1 *till sig själv är* $1/6$*. Här (precis som när vi har riktade grafer) så tillåter vi att man går från en nod till sig själv. Om man beräknar potenser av* M *så finner man att den stabiliserar sig på*

$$\begin{pmatrix} 0.4687 & 0.25 & 0.2812 \\ 0.4687 & 0.25 & 0.2812 \\ 0.4687 & 0.25 & 0.2812 \end{pmatrix}.$$

Om man beräknar egenvärden och egenvektorer så finner man (som ni kanske redan gissat) att 1 *är ett egenvärde med egenvektorn* $(0.4687\ 0.25\ 0.2812)^t$*. Denna svarar precis som i fallet ovan mot en stationär fördelning.*

Vi har följande generalisering av Sats 8. Det tekniska begreppet periodisk har vi inte definierat. Tänk på det som en generalisering av det varannanfenomen som en tvådelad graf gav.

Sats 10 *Antag att Markov-kedjan är sammanhängande (irreducibel) och att den inte är periodisk (svarar mot ej tvådelad). Då finns en unik stationär fördelning.*

Antag att vi vet att en Markov-kedja har en stationär fördelning $\mathbf{x}^t$. Då vet vi att $\mathbf{x}^t = \mathbf{x}^t M$ eller ekvivalent att $M^t\mathbf{x} = \mathbf{x}$. Vi ska alltså lösa det homogen ekvationssystemet

$$(M^t - I)\mathbf{x} = \mathbf{0}.$$

Detta ger ett alternativt sätt att bestämma den stationära fördelningen.

Övningar

1. Låt G vara en graf med grannmatrisen

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

(a) Visa hed hjälp av matrisoperationer att G är sammanhängande.

(b) Hur många vägar av längd 3 finns det från nod 1 till nod 2? (Använd återigen matrisenoperationer.)

(c) Bestäm övergångsmatrisen för slumpvandringen på G.

(d) Vad är den stationära fördelningen för slumpvandringen? (Finns det någon?)

(e) Ge en egenvektor och ett egenvärde till matrisen M^t. Inga fler räkningar behövs!

2. Låt

$$M = \frac{1}{12}\begin{vmatrix} 6 & 3 & 3 \\ 4 & 2 & 6 \\ 3 & 3 & 6 \end{vmatrix}$$

vara övergångsmatrisen för en Markov-kedja. Beräkna den stationära fördelningen.