Записки научных
семинаров ПОМИ
Том 419, 2013 г.

Ю. А. Альпин

ТЕОРЕМА ХАРАРИ О ЗНАКОВЫХ ГРАФАХ И ОБРАТИМОСТЬ ЦЕПЕЙ МАРКОВА

§1. Введение

Неотрицательная матрица $P = (p_{ij})$ порядка n называется стохастической, если её строчные суммы равны единице. Стохастические матрицы служат основным инструментом в теории цепей Маркова. При этом число p_{ij} понимается как вероятность перехода из i-го состояния цепи в j-е состояние за один такт времени. Стохастическая строка $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_n)$ (её элементы неотрицательны и в сумме равны единице) называется стационарным распределением цепи Маркова с матрицей переходных вероятностей P, если $\pi P = \pi$. Если матрица P неприводима, то, как хорошо известно из теории цепей Маркова, существует единственное стационарное распределение, причём все его элементы положительны. Поэтому корректно определяется матрица $\widehat{P} = \Pi^{-1} P^T \Pi$, где $\Pi = \operatorname{diag}(\pi_1, \dots, \pi_n)$. Матрица $\widehat{P}$, как легко проверить, тоже стохастическая. Она определяет так называемую обращённую цепь Маркова. Цепь Маркова с матрицей P называется обратимой, если $P = \widehat{P}$, то есть выполняется равенство

$$P = \Pi^{-1} P^T \Pi. \tag{1}$$

Известен следующий критерий Колмогорова обратимости цепи Маркова [1, 2].

Теорема 1. *Неприводимая цепь Маркова с матрицей переходных вероятностей $P = (p_{ij})$ обратима тогда и только тогда, когда для любой последовательности состояний $i_1, i_2, \dots, i_k$ имеет место равенство*

$$p_{i_1 i_2} \cdots p_{i_{k-1} i_k} p_{i_k i_1} = p_{i_1 i_k} p_{i_k i_{k-1}} \cdots p_{i_3 i_2} p_{i_2 i_1}. \tag{2}$$

Цель этой заметки – показать связь трёх сюжетов, развивавшихся, по-видимому, независимо: теоремы Харари о знаковых графах, задачи о диагональном подобии матриц и критерия обратимости цепи

Ключевые слова: стохастическая матрица, цепь Маркова, знаковый граф.

Маркова. В §2 для орграфов над группами доказывается аналог теоремы Харари о знаковых графах. Из этого результата в §3 выводится известная теорема о диагональном подобии матриц и, как следствие этой теоремы, – критерий Колмогорова обратимости цепи Маркова. В заключительном §4 предлагаются условия, при которых может быть сокращена проверка сбалансированности орграфа над группой и, следовательно, проверка диагонального подобия матриц и обратимости цепи Маркова.

§2. Теорема Харари для орграфов над группами

В 1954 г. Ф. Харари опубликовал теорему о балансе в знаковом графе [3]. Выражение "знаковый граф" означает, что каждому ребру графа приписан знак $+$ или $-$. Знаком маршрута считается произведение знаков его рёбер. Равносильно можно считать, что рёбрам приписаны числа 1 и -1. Знаковый граф называется сбалансированным, если любой его простой цикл положителен. Примем, что всюду дальше множеством вершин графа является множество $N = \{1, \dots, n\}$. Приведём теорему Харари в формулировке из [4].

Теорема 2. *Для знакового графа следующие утверждения эквивалентны:*

1) *граф сбалансирован;*

2) *все замкнутые маршруты в графе положительны;*

3) *для любых вершин i и j все маршруты, соединяющие эти вершины, имеют одинаковый знак;*

4) *множество вершин N можно разбить на две части N_1 и N_2 так, чтобы каждое положительное ребро соединяло вершины одной части и каждое отрицательное ребро соединяло вершины из разных частей.*

Теперь, имея ввиду цель этой статьи, перейдём к ориентированным графам. Путём в орграфе будем называть любую последовательность вершин $i_1 i_2 \dots i_k i_{k+1}$, в которой каждая пара $i_t i_{t+1}$ $(t = 1, \dots, k)$ является дугой. Путь называется простым, если его вершины различны, кроме, может быть, первой и последней. Замкнутый путь называется контуром. Произведение pq путей $p = i_1 \dots i_k$ и $q = j_1 \dots j_m$ определено, если последняя вершина p совпадает с первой вершиной q. В этом случае $pq = i_1 \dots i_k j_2 \dots j_m$. Умножение путей ассоциативно в

том смысле, что если произведение $(pq)r$ определено, то и произведение $p(qr)$ определено, причём $(pq)r = p(qr)$. Из ассоциативности следует, что скобки в произведении любого числа путей можно опускать. Длиной пути называется количество дуг пути с учётом возможных повторений. Выражение (i, j)-путь означает путь с первой вершиной i и последней вершиной j.

Пусть G – мультипликативная группа. Рассмотрим граф над группой G, то есть граф, каждой дуге которого приписан элемент G, называемый весом. Вес дуги ij обозначим $w(ij)$. Вес пути $p = i_1 i_2 \dots i_k i_{k+1}$ равен произведению весов его дуг:

$$w(p) = w(i_1 i_2) \cdots w(i_k i_{k+1}).$$

Вес произведения путей равен, очевидно, произведению их весов.

Сильно связный граф над группой G называется сбалансированным, если вес любого простого контура равен единице группы G, обозначаемой символом 1.

Теорема 3. *Для сильно связного графа над группой следующие условия равносильны:*

1) *граф сбалансирован;*
2) *все контуры в графе имеют вес* 1*;*
3) *для любых* i, j *все* (i, j)*-пути в графе имеют одинаковый вес;*
4) *существуют такие элементы группы* $d_1, \dots, d_n$*, что вес дуги* ij *выражается формулой*

$$w(ij) = d_i^{-1} d_j. \tag{3}$$

Доказательство. 1) $\Rightarrow$ 2). Если контур p не является простым, то его можно разложить в произведение вида $r_1 q r_2$, где q – простой контур (множитель r_1 или r_2 может отсутствовать). Удалив из p контур q, имеющий по условию 1) единичный вес, получим более короткий контур $r_1 r_2$ с тем же весом. Следовательно,

$$w(p) = w(r_1) w(q) w(r_2) = w(r_1) w(r_2) = w(r_1 r_2).$$

Если контур $r_1 r_2$ не является простым, то продолжим удаление простых контуров. Ясно, что на некотором шаге получится простой контур, вес которого по построению равен весу первоначального контура p, а по условию 1) равен единице. Итак, $w(p) = 1$.

2) $\Rightarrow$ 3). Предположим, есть (i, j)-пути p_1 и p_2. Ввиду сильной связности графа существует (j, i)-путь q. По условию 2) для контуров $p_1 q$ и $p_2 q$ имеем равенства $w(p_1 q) = w(p_2 q) = 1$. Отсюда $w(p_1) = w(p_2)$.

3) $\Rightarrow$ 4). Пусть i_0 – произвольно фиксированная вершина. Положим, что d_j – вес (i_0, j)-пути. Все (i_0, j)-пути имеют одинаковый вес, следовательно, элементы d_j определяются однозначно. Для любой вершины i и любой дуги ij имеет место равенство $d_i w(ij) = d_j$, поскольку элементы d_j и $d_i w(ij)$ являются весами (i_0, j)-путей. Следовательно, $w(ij) = d_i^{-1} d_j$.

4) $\Rightarrow$ 1). Рассмотрим произвольный контур $i_1 i_2 \dots i_k i_1$. Его вес равен

$$w(i_1 i_2) w(i_2 i_3) \cdots w(i_k i_1) = d_{i_1}^{-1} d_{i_2} d_{i_2}^{-1} \dots d_{i_k} d_{i_k}^{-1} d_{i_1} = 1;$$

следовательно, граф сбалансирован. □

Нетрудно заметить сходство в формулировках теорем 2 и 3. Оно делается очевидным, если знаковый граф рассматривать как граф над мультипликативной группой с элементами 1 и -1. В частности, условие 4) теоремы 2 эквивалентно тому, что каждую вершину i можно снабдить знаком (весом) $d_i \in \{1, -1\}$ таким способом, что знак ребра ij равен $d_i d_j = d_i^{-1} d_j$. Но это специальный случай условия 4) теоремы 3. Доказательство теоремы 2, как оно представлено в [4], легко преобразуется в доказательство теоремы 3, приведённое выше. Поэтому теорему 3 естественно назвать теоремой Харари для орграфов над группами. Некоторое отличие имеется в том, что в теореме 2 на граф не накладывается никаких условий, в то время как теорема 3 доказывается для сильно связного орграфа. Это отличие, однако, несущественно, так как нетривиальная часть доказательства теоремы 2 относится к связным графам, а сбалансированность несвязного графа сводится к сбалансированности его связных компонент.

Вообще же теорема 3 представляет собой своего рода "бродячий сюжет", независимо появляясь у различных авторов и по разным поводам. В частности, эквивалентное утверждение, хотя и в другой терминологии, содержится в [5, лемма 2.7.1], где оно служит для описания операторов экстремального сжатия. Импликация 2) $\Rightarrow$ 3) – центральный момент доказательства теоремы 3 – в неявном виде содержится в доказательстве критерия Колмогорова, приведённом в [2, теорема 1.7].

Простым вычислением доказывается следующее дополнение к п. 4) теоремы 3.

Следствие 1. *В сильно связном сбалансированном графе над группой для любых вершин i, j вес (i, j)-пути равен $d_i^{-1} d_j$.*

Интересно, что набор $d_1, \ldots, d_n$ определяется по существу единственным образом. Точнее, имеет место

Теорема 4. *Пусть для сильно связного графа над группой имеются два набора элементов группы $e_1, \ldots, e_n$ и $d_1, \ldots, d_n$ таких, что для любой дуги ij*

$$w(ij) = e_i^{-1} e_j = d_i^{-1} d_j.$$

Тогда существует такой элемент h группы, что

$$e_j = h d_j, \quad j = 1, \ldots, n. \tag{4}$$

Действительно, по следствию 1 вес любого (i, j)-пути равен

$$e_i^{-1} e_j = d_i^{-1} d_j.$$

Из этого равенства, положив $i = 1$ и $h = e_1 d_1^{-1}$, получим (4).

Из теоремы 4 следует, что различных наборов типа $d_1, \ldots, d_n$, составленных из элементов группы G и определяющих веса дуг сбалансированного графа над G по формуле (3), имеется столько, сколько элементов в G. В частности, для знакового графа их ровно два. Это (в другой терминологии) доказано в [5, теорема 1].

§3. Диагональное подобие матриц и критерий обратимости цепи Маркова

Рассуждения в этом параграфе, если не оговорено иное, относятся к матрицам порядка n над произвольным полем. Говорят, что матрица A диагонально подобна матрице B, если существует обратимая диагональная матрица D, такая, что $A = D^{-1} B D$.

Теорема 5 ([6, теорема 4.1])**.** *Неприводимые матрицы $A = (a_{ij})$ и $B = (b_{ij})$ диагонально подобны тогда и только тогда, когда для любой последовательности попарно различных индексов $i_1, i_2, \ldots, i_k$ имеет место равенство*

$$a_{i_1 i_2} \cdots a_{i_{k-1} i_k} a_{i_k i_1} = b_{i_1 i_2} \cdots b_{i_{k-1} i_k} b_{i_k i_1}. \tag{5}$$

Мы докажем теорему, эквивалентную теореме 5, используя понятие графа матрицы. Это делает критерий диагонального подобия более прозрачным, так как позволяет отделить комбинаторную часть критерия от арифметической. При этом сам критерий легко следует из теоремы 3. Напомним, что графом матрицы $A = (a_{ij})$ называют орграф, в котором дуга ij существует, если $a_{ij} \neq 0$. Таким образом,

граф матрицы отражает расположение ненулевых элементов матрицы, её комбинаторную структуру. Приписав каждой дуге ij вес a_{ij}, получим граф над мультипликативной группой поля. Как известно, неприводимость матрицы равносильна сильной связности её графа.

Предположим, что граф у матриц A и B один и тот же. Наделим дуги графа весами по правилу $w(ij) = a_{ij}(b_{ij})^{-1}$ и обозначим этот нагруженный граф $\Gamma(A/B)$.

Лемма 1. *Матрицы A и B диагонально подобны тогда и только тогда, когда выполнены следующие два условия:*

1) *графы матриц A и B совпадают;*
2) *граф $\Gamma(A/B)$ сбалансирован.*

Доказательство. Пусть для матрицы $D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n)$ имеем $A = D^{-1}BD$, то есть

$$a_{ij} = d_i^{-1} b_{ij} d_j \quad \text{для любых } i,\, j. \tag{6}$$

Из равенств (6) видно, что граф у матриц A и B один и тот же, причём для любой дуги ij в графе $\Gamma(A/B)$

$$w(ij) = d_i^{-1} d_j. \tag{7}$$

Согласно теореме 3 подобные представления для весов дуг имеет лишь сбалансированный граф.

Обратно, пусть выполнены условия леммы. По теореме 3 существуют такие ненулевые элементы поля $d_1, \ldots, d_n$, что для любой дуги ij графа $\Gamma(A/B)$

$$w(ij) = a_{ij}(b_{ij})^{-1} = d_i^{-1} d_j;$$

следовательно, $a_{ij} = d_i^{-1} b_{ij} d_j$. Но это равенство выполняется для любых i, j, поскольку $a_{ij} = 0 \;\Leftrightarrow\; b_{ij} = 0$. Следовательно, при $D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n)$ имеем $A = D^{-1}BD$, что и требовалось доказать. $\square$

Замечание. Как видно из доказательства леммы 1, теорема 3 даёт и способ вычисления преобразующей матрицы $D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n)$. Достаточно фиксировать некоторую вершину i_0 и определить элемент d_j как вес любого из (i_0, j)-путей в графе $\Gamma(A/B)$. Из теоремы 4 следует, что для неприводимых диагонально подобных матриц существует единственная (с точностью до скалярного множителя) преобразующая матрица D. Впервые этот факт был доказан в [6, следствие 4.4].

Сформулируем критерий диагонального подобия непосредственно в терминах матриц A и B.

Теорема 6. *Неприводимые матрицы A и B диагонально подобны тогда и только тогда, когда выполнены следующие условия:*

1) *графы матриц A и B совпадают;*

2) *A-вес и B-вес любого простого контура $i_1 i_2 \dots i_k i_1$ равны, то есть*

$$a_{i_1 i_2} \cdots a_{i_k i_1} = b_{i_1 i_2} \cdots b_{i_k i_1}.$$

Для доказательства теоремы 6 достаточно заметить, что вес контура $i_1 i_2 \dots i_k i_1$ в графе $\Gamma(A/B)$ равен 1 в точности тогда, когда A-вес и B-вес этого контура равны.

Применим критерий диагонального подобия теоремы 6 к взаимно транспонированным матрицам $A = (a_{ij})$ и $A^T = (a^T_{ij})$. Графы A и A^T совпадают, если в графе A для всякой дуги ij существует противоположно направленная дуга ji. Графы с этим свойством называют симметричными, а матрицы с симметричным графом – комбинаторно симметричными. В симметричном графе вместе с путём $i_1 i_2 \dots i_k i_{k+1}$ существует обращённый путь $i_{k+1} i_k \dots i_2 i_1$. В частности, для всякого контура существует обращённый контур. Поскольку $a^T_{i_1 i_2} \cdots a^T_{i_{k-1} i_k} a^T_{i_k i_1} = a_{i_1 i_k} a_{i_k i_{k-1}} \cdots a_{i_2 i_1}$, то условие 2) теоремы 6 становится условием равенства весов взаимно обращённых контуров в графе A. В результате получаем

Следствие 2. *Пусть A – неприводимая матрица. Матрицы A и A^T диагонально подобны тогда и только тогда, когда выполнены следующие два условия:*

1) *матрица A комбинаторно симметрична, то есть граф A симметричен;*

2) *в графе A вес любого простого контура $i_1 i_2 \dots i_{k-1} i_k i_1$ равен весу обращённого контура:*

$$a_{i_1 i_2} \cdots a_{i_{k-1} i_k} a_{i_k i_1} = a_{i_1 i_k} a_{i_k i_{k-1}} \cdots a_{i_2 i_1}.$$

Переформулируем следствие 2 в духе теоремы 5, не используя графы матриц.

Следствие 3. *Пусть A – неприводимая матрица. Матрицы A и A^T диагонально подобны тогда и только тогда, когда для любой последовательности попарно различных индексов $i_1, i_2, \dots, i_k$ имеет место равенство*

$$a_{i_1 i_2} \cdots a_{i_{k-1} i_k} a_{i_k i_1} = a_{i_1 i_k} a_{i_k i_{k-1}} \cdots a_{i_2 i_1}.$$

Сравнивая следствие 3 и теорему 1, можно видеть, что критерий Колмогорова обратимости цепи Маркова применим в более широкой области: он одновременно является условием диагонального подобия взаимно транспонированных матриц над произвольным полем.

Но теорема 1 утверждает нечто большее, чем диагональное подобие матриц P и P^T. А именно: из условий (2) следует, что преобразующей матрицей является матрица Π (см. равенство (1)). При этом Π – единственная (с точностью до скалярного множителя) комплексная преобразующая матрица. Покажем, что эти факты вытекают из более общего утверждения.

Пусть A и B – неотрицательные неприводимые матрицы. Оказывается, что в этом случае преобразующая диагональная матрица D полностью определяется перроновыми векторами матриц A и B.

Напомним (см., например, [7, теорема 8.4.4]), что согласно теореме Перрона–Фробениуса для неприводимой неотрицательной матрицы A спектральный радиус $\rho = \rho(A)$ является простым собственным значением. Существуют положительный вектор-столбец x и положительный вектор-строка y такие, что $Ax = \rho x$ и $yA = \rho y$. Они называются перроновыми векторами, правым и левым соответственно. Ввиду простоты $\rho(A)$ любой, в том числе комплексный, правый собственный вектор отличается от x, самое большее, скалярным множителем. Аналогично обстоит дело и с левыми собственными векторами.

Теорема 7. *Если неотрицательные неприводимые матрицы A и B порядка n диагонально подобны, то преобразующая матрица $D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n)$ однозначно, с точностью до скалярного множителя, определяется равенствами*

$$d_i = y_i (x_i)^{-1}, \quad i = 1, \ldots, n,$$

где $x = (x_i)$, $y = (y_i)$ – правые перроновы векторы матриц A и B соответственно.

Доказательство. Пусть выполнено равенство $A = D^{-1}BD$, значит, и равенство $DA = BD$. Умножим последнее на x: $DAx = \rho Dx = BDx$. По указанному выше свойству перроновых векторов ненулевой комплексный вектор Dx можно представить в виде $Dx = cy$, где $c \neq 0$ – скалярный множитель. В поэлементной записи: $d_i x_i = c y_i$. Отсюда

$$d_i = c y_i (x_i)^{-1}, \quad i = 1, \ldots, n, \tag{8}$$

что и требовалось доказать. □

Применяя теорему 3 к взаимно транспонированным матрицам A и A^T и учитывая, что правый перронов вектор для A^T после транспонирования превращается в левый перронов вектор для A, получаем

Следствие 4. *Если неотрицательные неприводимые матрицы A и A^T диагонально подобны, то, с точностью до скалярного множителя, преобразующая матрица $D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n)$ определяется равенствами*

$$d_i = x_i (y_i)^{-1}, \quad i = 1, \ldots, n,$$

где $x = (x_1, \ldots, x_n)^T$ – правый, а $y = (y_1, \ldots, y_n)$ – левый перроновы векторы матрицы A соответственно.

Наконец, вернёмся к стохастическим матрицам. Для неприводимой стохастической матрицы спектральный радиус равен 1, столбец из единиц является правым перроновым вектором, стационарное распределение π – левым перроновым вектором. Применяя следствие 4, получаем

Следствие 5. *Пусть P – стохастическая неприводимая матрица. Если матрицы P и P^T диагонально подобны, то матрица Π – единственная, с точностью до скалярного множителя, диагональная комплексная матрица, для которой выполняется равенство* (1).

§4. О проверке сбалансированности графа над группой

Как видно из предыдущего изложения, для решения вопроса о диагональном подобии матриц и обратимости цепи Маркова важно знать, сбалансирован ли соответствующий граф над группой. Очевидный способ определения сбалансированности заключается в том, чтобы найти все простые контуры и проверить, имеют ли они единичный вес. Однако иногда проще воспользоваться следующей теоремой.

Теорема 8. *Пусть в графе любая вершина достижима из любой другой вершины путём длины $\leqslant l$. Предположим, что вес любого простого контура длины $\leqslant 2l + 1$ равен 1. Тогда вес любого контура равен 1, то есть граф сбалансирован.*

Доказательство. Вначале заметим, что если предположение относительно весов выполняется для простых контуров длины $\leqslant 2l+1$, то оно выполняется для всех контуров длины $\leqslant 2l+1$. Аргументы здесь точно те же, что в первой части доказательства теоремы 3.

Теперь докажем, что вес любого контура $p = i_1 i_2 \dots i_k i_1$ длины $> 2l+1$ равен весу некоторого контура меньшей длины. Отсюда, очевидно, последует утверждение теоремы. Разложим контур p в произведение $p = p_1 p_2$, где p_1 – (i_1, i_{l+2})-путь длины $l+1$. По предположению теоремы существуют пути q_1 и q_2 из i_1 в i_{l+2} и из i_{l+2} в i_1, длины которых не больше, чем l. Рассмотрим контуры $q_1 q_2$ и $p_1 q_2$, длины которых не больше, чем $2l$ и $2l+1$ соответственно. По условию теоремы $w(q_1 q_2) = w(p_1 q_2) = 1$, откуда следует, что $w(q_1) = w(p_1)$. Заменив в контуре $p = p_1 p_2$ путь p_1 путём q_1, получим контур $q_1 p_2$, вес которого равен весу контура p, а длина меньше. Это завершает доказательство. $\square$

Рассмотрим в качестве примера полный граф, в котором для любых вершин i, j существует дуга ij. По теореме 8 для сбалансированности полного графа достаточно, чтобы контуры длины $\leqslant 3$ имели вес 1. Соответственно ограничивается проверка диагонального подобия матриц, не содержащих нулей, а также проверка обратимости цепи Маркова в том случае, когда матрица переходных вероятностей цепи не содержит нулей.

Литература

1. A. N. Kolmogoroff, *Zur Theorie der Markoffschen Ketten.* — Math. Ann. **112** (1936), 155–160.
2. F. P. Kelly, *Reversibility and stochastic networks.* John Wiley, New York, 1979.
3. F. Harary, *On the notion of balance of a signed graph.* — Michigan Math. J. **2** (1954), 143–146.
4. Ф. С. Робертс, *Дискретные математические модели с приложениями к социальным, биологическим и экологическим задачам.* Наука, М., 1986.
5. Г. Р. Белицкий, Ю. И. Любич. *Нормы матриц и их приложения.* Наукова думка, Киев, 1984.
6. F. Harary, J. K. Kabell, *A simple algorithm to detect balance in signed graphs.* — Math. Social Sci. **1** (1980), 131–136.
7. G. M. Engel, H. Schneider, *Cyclic and diagonal products on a matrix.* — Linear Algebra Appl. **7** (1973), 301–335.
8. Р. Хорн, Ч. Джонсон, *Матричный анализ.* Мир, М. 1989.

Al'pin Yu. A. Harary's theorem on signed graphs and reversibility of Markov chains.

A counterpart of the well-known Harary theorem on signed graphs is proved for digraphs over groups. This result is then used to derive a known

theorem on the diagonal similarity of matrices and Kolmogorov's criterion of the reversibility of Markov chains.

Казанский федеральный университет
Кремлевская ул. 8, 420008 Казань, Россия
E-mail: Yuri.Alpin@ksu.ru

Поступило 25 июня 2013 г.