

離散システムの不変な階層構造を求めて ——グラフからマトロイドへ

室田 一雄

1 はじめに

化学プラントや集積回路のような工学システムはますます大規模になっている。きわめて多数の構成要素からなる大規模離散システム全体のマクロな特性は、個々の要素のミクロな特性が複雑に絡み合った結果として生じてくる。したがって、大規模システムを扱うときには、個々の要素の特性を別々に詳しく解析するだけでなく、構成要素間の絡み方(システムの組合せ構造)を正しく記述し把握することが大切である。その際、機能の単位となる「部分システム」に分解し、それらの間の相互作用を考えるとというアプローチが定石である。

構成要素間の相互関係を考えるには、解析学に数学的基礎をおく手法とは質的に異なる数理的手法が必要である。グラフ理論に代表されるような組合せ・離散数学(物と物との関係やある性質を満たす物の集まりの性質を論じる数学)がそのために有用であることが次第に明らかになってきた[1]。事実、化学工学、電気・電子工学、制御工学、計算機工学などをはじめとする多くの分野で、システムの「構造」を記述する言語としてグラフ理論の概念は様々に利用されてきた。我が国において比較的早い時期にグラフ理論的な考え方をシステム解析に応用した成功例の一つとして、化学プロセスシミュレータ JUSE-GIFS と DPS の名を挙げることができる。これは 1970 年代初頭から日本科学技術連盟が開発してきたもので、実用シミュレータとして外国の企業にも売れたと聞いている。

離散数学がシステムを記述するための言語にとどまらずシステム解析に有用な実用技術として成長してきた背景として、1970 年代にグラフ・ネットワー

[筆者紹介]



むろた かずお。1980 年東京大学大学院修士課程修了。同年東京大学計数工学科助手。1983 年筑波大学社会工学系講師。1986 年東京大学計数工学科助教授。現在に至る。工学博士。数値計算法、グラフ・マトロイド理論などの研究に従事。著書: Systems Analysis by Graphs and Matroids —— Structural Solvability and Controllability, Springer, 1987。日本オペレーションズ・リサーチ学会、計測自動制御学会会員。

ク構造を計算機で扱うための効率的なアルゴリズムとデータ構造が次々と発見されたこと、そしてそれを契機として組合せ・離散数学をアルゴリズムの観点から論じる計算量の理論が計算機科学の一分野として確立されるに至ったことを見逃すことはできない。組合せ最適化の分野、特に、グラフ・ネットワーク・マトロイド理論[2]には効率的な算法と結び付いた成果が数多くあり、現在でもまだまだ利用すべき有用なものが残されている。

すでに書いたように、大規模システムの構造解析においては機能の単位としての部分システムとそれらの間の組合せ構造(相互関係)を把握することが重要である。もちろん、どのような機能を単位と見なしてどのような構造に着目するかに応じて「部分システム」の概念自体が変わって当然であるし、どのような機能と構造に着目すべきかは工学上の事情から定まるべきことであって数学上の都合で決めるべきことではない。しかし、着目すべき機能と構造が与えられれば、それに応じた「部分システム」というものができるだけ客観的に数学的に定まってほしいと思うのが応用数理の立場であろう。本稿では、部分システム間の構造(相互関係)として階層構造を取り上げ、方程式系で記述されるシステムの部分システムへの階層的分解(いわゆるブロック三角化)にまつわる数理を論じる。

各節の要約は以下のとおりである。

[第2節] 与えられた方程式系に対してどの変数がどの方程式に現れるかという情報(方程式系の非零構造)に基づいた階層構造が一意的に確定する。これは変数と方程式の並べ換えによるブロック三角化であり、グラフ理論において Dulmage-Mendelsohn 分解と呼ばれる理論的にも実用的にも最も基本的な手法である。

[第3節] 物理現象を記述する数式の形は物理的に一意に定まるものではない。特に、方程式系の非零構造に基づく階層分解は数式による記述のしかたによって変わるので物理システムに内在するものとは考えにくい。物理的に意味をもつような階層構造は数式表現によらずに定まる「不変量」になっているはずである。「数学モデル」と「数式表現」とをあえて区別して考察し、数式表現に含まれる恣意性について反省してみる。

[第4節] 離散システムの組合せ構造を記述する道具として層混合行列(LM 行列)の概念がある。数式表現のもつ恣意性は LM 行列に対する許容変換として吸収される。LM 行列は許容変換の下で一意的に定まるブロック三角形の正準形(組合せ論的正準形(CCF))をもつ。これが数式表現の恣意性によらない不変な階層構造であると解釈できる。CCF は Dulmage-Mendelsohn 分解の拡張である。LM 行列の階数や CCF などはマトロイド理論の成果を利用したネットワーク型算法によって効率的に計算できるので、LM 行列の概念は大規模システム解析の実用の道具として役に立つ。

2 非零構造に着目した階層的分解

変数 $x (\in \mathbb{R}^n)$ に関する n 元方程式系

$$F(x) = 0 \quad (2.1)$$

が階層構造をもつ物理/工学システムを記述している場合には、変数と方程式とを適当に分割して並べ換えることによって小さな部分システムに分解できることが多い。 F の Jacobi 行列を A とすれば、変数 x_j が方程式 F_i に含まれているときに $A_{ij} \neq 0$ である。すなわち、どの変数がどの方程式に現れるかという情報は行列 A の零/非零パターンとして表現される。システムの最も基本的な組合せ構造として非零要素の位置だけに着目して階層構造を考えるのは自然であろう。本節を通じて、 A の非零要素の値を無視して独立な変数と見なすことにする。

方程式系 (2.1) の変数と方程式を並べ換えることは、二つの置換行列 P_r, P_c を用いて A を

$$\bar{A} = P_r A P_c \quad (2.2)$$

と変換することに相当する。ここで、変数と方程式の間には何も対応関係を仮定していないので、別々の置換行列を用いて互いに独立に並べ換えている。システムの階層的分解という我々の課題は、行列 \bar{A} が図 1 のようなブロック三角形になるような置換行列 (P_r と P_c) および変数と方程式の分割を求めるといふ数学的問題に翻訳される。

まずは簡単な例題として図 2 の行列 A を考えよう (この例は数学的な側面を説明するためのものであって工学的意味はない)。行 (方程式) と列 (変数) をそれぞれ四つのブロック

$$R_1 = \{F_3, F_4\}, R_2 = \{F_5\}, R_3 = \{F_1\}, R_4 = \{F_2, F_6\};$$

$$C_1 = \{x_2, x_4\}, C_2 = \{x_3\}, C_3 = \{x_6\}, C_4 = \{x_1, x_5\}$$

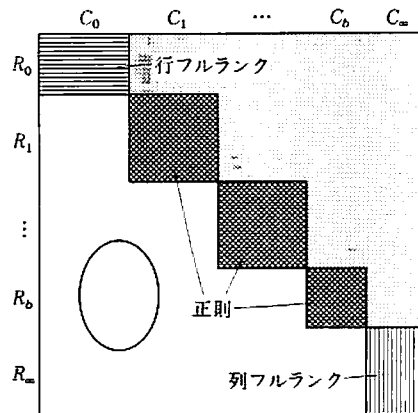


図 1 ブロック三角化

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
F_1	t_1	0	0	0	0	t_2
F_2	t_3	0	0	0	t_4	0
$A = F_3$	0	t_5	0	t_6	t_7	0
F_4	0	t_8	0	t_9	t_{10}	t_{11}
F_5	0	0	t_{12}	0	0	t_{13}
F_6	t_{14}	0	0	0	t_{15}	0

図 2

		C_1		C_2	C_3	C_4		
		x_2	x_4	x_3	x_6	x_1	x_5	
$\bar{A} =$	R_1	F_3	t_5	t_6		0	0	t_7
		F_4	t_8	t_9		t_{11}	0	t_{10}
	R_2	F_5			t_{12}	t_{13}	0	0
	R_3	F_1				t_2	t_1	0
R_4	F_2					t_3	t_4	
	F_6					t_{14}	t_{15}	

図 3

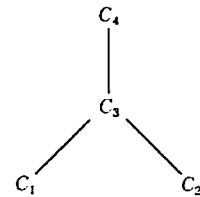


図 4

に分割して、 A の行と列をブロックの添字の示す順序に従って並べ換えると、図 3 のようにブロック三角化される。各ブロックに対応する対角部分行列 $\bar{A}[R_k, C_k]$ は正則であり、ブロック間には図 4 のような半順序関係が定義される。ここで、 C_1 と C_2 が順序関係をもたないのは、 \bar{A} の第 3 列 (x_3 の列) の最初の 2 行 (F_3, F_4 の行) の要素が 0 であることに対応している。ブロック間の階層構造として本質的なのは、添字の示す(全)順序ではなく、このような半順序構造である。

このようなブロック三角化は数値計算技術としても有効である。方程式系 (2.1) を Newton 法などで数値的に解くとすると、 $Ax=y$ の形の線形化方程式を繰り返し解くことになる。係数行列 A がブロック三角化されていれば、右下のブロックから始めて対角ブロックを係数行列とする部分問題を順次解いていけばよい。ここで、 A の要素の値は毎回変化するが、 A の非零要素の位置は同じであるから、図 1 のような階層構造は不変である。階層構造は反復計算にはいる前に求めておくことができる。

ブロック三角化の概念は上例と図 1 からほぼ明らかであろうが、後の準備も兼ねて、長方形の場合をも含めた定義を与えておこう。行列 \bar{A} の行集合と列集合の分割

$$(R_0; R_1, \dots, R_k; R_\infty), (C_0; C_1, \dots, C_b; C_\infty)$$

が与えられているとする。ただし、 $|R_0| \leq |C_0|, |R_\infty| \geq |C_\infty|$ とし、 $R_0, C_0, R_\infty, C_\infty$ は空集合を許す。 \bar{A} が(この分割に関して)ブロック三角化されているとは、

条件 B1: $\bar{A}[R_k, C_l] = 0$ if $0 \leq l < k \leq \infty$;

条件 B2: $|R_0| < |C_0|$ if $R_0 \neq \phi$.

$$|R_k| = |C_k| > 0 \quad \text{for } k = 1, \dots, b.$$

$$|R_\infty| > |C_\infty| \quad \text{if } C_\infty \neq \phi:$$

条件 B3: $\text{rank } \bar{A}[R_k, C_k] = \min(|R_k|, |C_k|)$ for $k = 0, 1, \dots, b, \infty$:

を満たすことと定義する。

正則行列に対しては $R_0 = C_0 = R_\infty = C_\infty = \phi$ である。特異行列のランク落ちは、左上の横長ブロック $\bar{A}[R_0, C_0]$ と右下の縦長ブロック $\bar{A}[R_\infty, C_\infty]$ に集約される。

行列 \bar{A} がブロック三角形ならば、上例で見たように、 \bar{A} の非零構造に基づいてブロック間に半順序が自然に誘導される。すなわち、 $\bar{A}[R_k, C_l] \neq 0$ のとき C_k は C_l の下位にあると定める。下位のブロックを左上に、上位のブロックを右下に並べることにより、図1のような陽な形のブロック三角形が得られる。

上の条件 B2, B3 は対角ブロックがそれぞれで一つの整合的な方程式系に対応する機能単位であって「部分システム」と見なしうることを表し、条件 B1 は部分システム間の相互作用が階層的であることを表現している。このようにして、システムの階層的分解という工学的問題は上の3条件を満たす変数と方程式の分割という数学の問題として定式化することができた。

条件 B1~B3 を満たす分割の性質は、グラフ理論において2部グラフ上のマッチングと被覆の理論[2]という形ですでに調べられている。行列 A の非零パターンは、行集合 $\{F_i\}$ と列集合 $\{x_j\}$ を頂点集合とし、 $A_{ij} \neq 0$ のとき F_i から x_j への有向枝をもつ2部グラフ G によって表現される(図2の行列のグラフを図5に示す)。枝の集合 M は、 M に属するどの二つの枝も端点を共有しないと

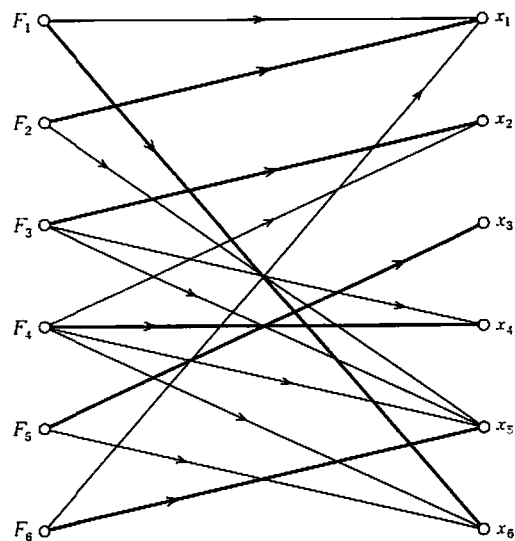


図5 2部グラフ G (太線は最大マッチング M)

きにマッチングと呼ばれるが、条件 B3 は、対角ブロックを表す G の部分グラフが行集合または列集合に等しい大きさのマッチングをもつことに対応している。一方条件 B1 は、 $(R_0 \cup R_1 \cup \dots \cup R_k) \cup (C_{k+1} \cup \dots \cup C_b \cup C_\infty)$ に対応する G の頂点集合が G の被覆であることを表している。

1960 年前後に得られた結果によれば、条件 B1~B3 を満たすようなものの中かで最も細かい分解が存在する。この一意的に定まるブロック三角化は Dulmage-Mendelsohn 分解(略して DM 分解)と呼ばれる。上記の「最も細かい分解」の正確な意味は、条件 B1~B3 を満たす任意の分割の定める C の分割と半順序は DM 分解の集約(いくつかのブロックを合併すること)によって得られるということである。

この数学的事実の工学的意義は明白である。方程式系の非零構造だけに着目したときに「部分システム」とそれらの間の「階層構造」という概念が客観的に(一意的に)確定し、それは DM 分解で与えられる。である。言うまでもないが、このような解釈に数学的証明を与えることは原理的に不可能である。このような解釈を支えるものは数学論理の外にはみでた応用数理であるから。

本節の最後に、DM 分解を求める算法を図 2 の例題に即しながら正則行列に限って説明する(第 4 節の CCF を求める算法も参照)。上述のような 2 部グラフ G を考え(図 5)。 G 上のマッチング M の中で $|M|$ が最大のもの(最大マッチング)を一つ固定する。図 5 の太線は、 $M = \{t_2, t_3, t_5, t_9, t_{12}, t_{15}\}$ と選んだもの

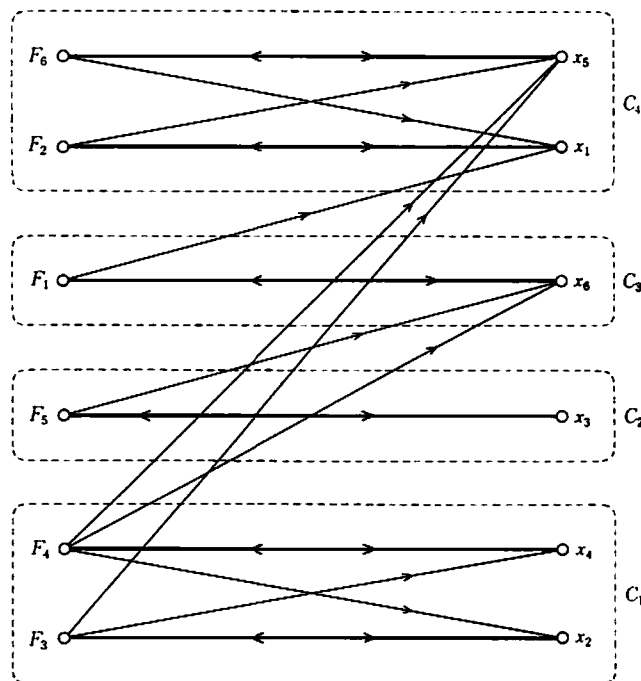


図 6 グラフ G_M の強連結成分分解

である。 M に属する各枝の逆向きの枝を G に付け加えたグラフを G_M とする。 G_M の強連結成分分解は最大マッチング M の選び方によらずに確定し、これが DM 分解における分割と半順序を与える。図 6 は例題に対する G_M の強連結成分分解を示したものであり、その分割と半順序はすでに示した DM 分解に一致している。このようにして DM 分解を求める手間は問題の規模 n の低次の多項式のオーダー ($n^{2.5}$ とか n^3) で抑えられる (正則とは限らない一般の場合の算法もほぼ同様である [2][3])。

3 数式表現の恣意性と分解の不変性

前節に述べたように、方程式系が与えられればその非零構造から「部分システム」と「階層構造」が DM 分解という形で一意に確定する。しかも DM 分解はグラフ論的算法によって高速に求められる。まさにグラフ理論万歳である。しかし、それはあくまで方程式系の非零構造を出発点としての話である。その出発点は本当に正しかったのだろうか。本節では、物理現象の記述のしかたに関する考察を通じてグラフ論的手法の問題点を指摘し、次節に展開するマトロイド論的手法の必然性を説明する。

工学システムを数理的に扱う際の抽象化・数学化の過程は現実の物理現象から始まって、適当な数学モデルを設定し、それを適当な数式を用いて記述して、さらに計算機の中のデータとして処理して…、というように何段階もの意思決定を含んでいる。計算機処理の結果として我々の手許に出てくる「部分システム」とか「階層構造」というものもこれらの意思決定の産物である。したがって、少なからぬ恣意性を含んでしまう。その恣意性をできるだけ排除して工学システムに内在する構造を見たい。抽象化の過程の中で最も重要な部分は数学モデルの設定であろうが、ここではその次の段階に位置する数式表現とその恣意性という問題に限って議論したい。

簡単な例題を用いてこの問題を考えよう。図 7 のように、二つの抵抗 r_1, r_2

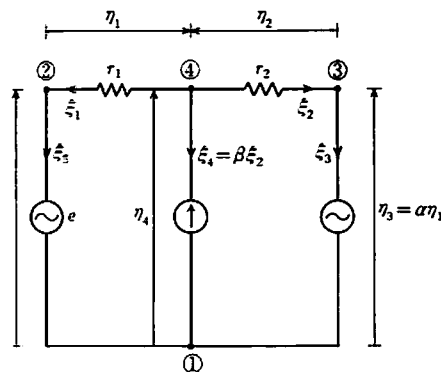


図 7 例題の電気回路

(枝 1, 枝 2), 枝 1 の電圧で制御された電圧源(枝 3), 枝 2 の電流で制御された電流源(枝 4), 電圧源 e (枝 5)の五つの素子から成る電気回路を考える。システムの数学的記述の第一歩は適当な変数の選択である。ここでは、各枝の電流 $\xi_i (i=1, \dots, 5)$ と電圧 $\eta_i (i=1, \dots, 5)$ を採用する。すると上に述べた各素子の特性は

$$\begin{aligned} \eta_1 &= r_1 \xi_1, \quad \eta_2 = r_2 \xi_2, \quad \eta_3 = a \eta_1, \\ \xi_4 &= \beta \xi_2, \quad \eta_5 = e \end{aligned} \tag{3.1}$$

と表現できる。一方、素子の接続関係は図 7 に示したとおりであって、電流と電圧はそれぞれ Kirchhoff の法則という保存則に従う。以上がこのシステムの数学モデルであると考えるところとする。

Kirchhoff の法則を数式の形に表現しよう。電流則は①, ②, ③の 3 点のそれぞれに流入する電流の和を考えて

$$\xi_3 + \xi_4 + \xi_5 = 0, \quad \xi_1 - \xi_5 = 0, \quad \xi_2 - \xi_3 = 0 \tag{3.2}$$

と書ける。電圧則は枝 1-枝 5-枝 4, 枝 2-枝 3-枝 4 の二つの閉路に沿う電圧の和を考えて

$$\eta_1 + \eta_5 - \eta_4 = 0, \quad \eta_2 + \eta_3 - \eta_4 = 0 \tag{3.3}$$

と書ける。保存則(3.2), (3.3)と素子特性(3.1)を合わせた方程式系がこのシステムの数式表現であり、その係数行列は図 8 のようになっている。

前節のグラフ論的分解手法を適用して行列 $A^{(1)}$ の DM 分解を求めると、10 個の変数は $C_1 = \{\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4, \xi_5, \eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4\}$, $C_2 = \{\eta_5\}$ の 2 組に分かれる。すなわち、 $A^{(1)}$ による数式表現から出発すると、このシステムは二つの部分システムから成ると結論される。

ところで、Kirchhoff の法則の書き表し方は(3.2), (3.3)に限らない。例えば、②, ③, ④の 3 点に流入する電流を考えて

$$\xi_1 - \xi_5 = 0, \quad \xi_2 - \xi_3 = 0, \quad \xi_1 + \xi_2 + \xi_4 = 0 \tag{3.4}$$

としても(3.2)と同等であるし、枝 1-枝 5-枝 4, 枝 1-枝 2-枝 3-枝 5 の二つの

$$A^{(1)} = \begin{array}{c|cccccccccc} & \xi_1 & \xi_2 & \xi_3 & \xi_4 & \xi_5 & \eta_1 & \eta_2 & \eta_3 & \eta_4 & \eta_5 \\ \hline & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & & & & & \\ & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & & & & & \\ & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & & & & & \\ & & & & & & 1 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ & & & & & & 0 & 1 & 1 & -1 & 0 \\ \hline r_1 & & & & & & -1 & & & & \\ & & r_2 & & & & & -1 & & & \\ & & & 0 & & & a & & -1 & & \\ & & & & \beta & & & & & -1 & \\ & & & & & -1 & & & & & 0 \\ & & & & & & 0 & & & & -1 \end{array}$$

図 8

たのではだめであって、一步遡って数学モデルから出発して、数式表現のもつ自由度(恣意性)について考察する必要がある。数式表現の自由度として最も重要なものは変数の選び方であろう。上例でも枝電流 ξ の代わりに網目電流を、あるいは枝電圧 η の代わりに節点電位を選んでもよかったはずである。しかし、当面は変数のとり方は固定して考えることにする。それでも、すでに見たように、物理法則の表現のしかたは様々である。

電気回路を支配する物理法則は二種類に分けられる。一方は素子特性(Ohmの法則など)であり、他方は素子の接続関係で決まる Kirchhoff の保存則である。前者を表現する(3.1)のような方程式は構成方程式(constitutive equations)、後者を表す(3.2)、(3.3)のような式は構造方程式(structural equations)という名で区別されることもある。このような区別は何も電気回路に限ったことではない。連続体の問題における Poisson 方程式 $\text{div}(\kappa \text{grad } u) = \rho$ も、勾配とフラックスを表す補助変数 v, w を導入すれば、構成方程式(素子特性)に相当する $u = \kappa v$ と構造方程式(保存則)に相当する $v = \text{grad } u, \text{div } w = \rho$ に分けることができる。

離散システムの数式表現において、構成方程式の部分の非零構造は比較的安定である。例えば、(3.1)において個々の方程式はそれ自体で意味をもっている。第1の方程式 $\eta_1 = r_1 \xi_1$ は枝1に関する Ohm の法則を表現している。抵抗 r_1 の代わりにコンダクタンス $g_1 = 1/r_1$ を物理パラメータとして採用して $\xi_1 = g_1 \eta_1$ の形に書いても方程式の非零構造には影響しない。数学的な観点からは第1と第2の方程式 $\eta_1 = r_1 \xi_1, \eta_2 = r_2 \xi_2$ を混ぜ合わせて $\eta_1 + \eta_2 = r_1 \xi_1 + r_2 \xi_2, \eta_1 - \eta_2 = r_1 \xi_1 - r_2 \xi_2$ のように表現する自由度も残っているが、こんな自由度はシステムの組合せ構造とは無縁である。

これとは対照的に、構造方程式の部分の非零構造は脆弱である。実際、上例の二つの数式表現 $A^{(1)}, A^{(2)}$ から異なる階層分解が生じた原因は保存則の表現の非一意性であった。電流則について考えよう(電圧則についても同様である)。電流保存則の二つの表現(3.2)、(3.4)は数学的に同等であるばかりでなく、離散システムの組合せ構造の表現という観点からもそれ自体優劣はないように見える。そもそも電流保存則は $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)$ がある線形部分空間に属すべきことを述べたものであり、その部分空間を $\{\xi | Q\xi = 0\}$ の形に表現するしかたに応じて(3.2)や(3.4)のような異なった数式表現が生じてくる。もちろん、(3.2)と(3.4)は数学的に同等であるから、(3.2)の係数行列 $Q^{(1)}$ と(3.4)の係数行列 $Q^{(2)}$ とは正則行列 S によって $Q^{(2)} = SQ^{(1)}$ のような関係をもっている。このように、構造方程式(保存則の表現)の部分については、個々の方程式に絶対的な意味はなく、正則行列による行変換の分の自由度をもっている。

システムに内在する階層構造を抽出するには数式表現によらない「不変量」に着目しなければならない。というのが我々の信念であった。素子特性を表す

構成方程式の非零構造はシステムに内在する組合せ構造であると見てよさそうである。では、保存則を表す構造方程式に内在するもの、行変換の自由度の下で最大の情報量をもつ不変量は何か、それは係数行列の列ベクトルの間の独立性、すなわち、係数行列の定める変数間のマトロイド構造^{*}に他ならない。

以上の考察から、グラフ論的分解手法の限界を乗り越えるための指針が得られた：

「素子特性の定める非零構造」と「保存則の定めるマトロイド構造」に基づいて「部分システム」と「階層構造」を抽出せよ。

次節でそのための数学を展開する。不変な階層構造が一意的に定まり、それが効率的算法によって求められることが示される。

4 LM 行列による数式表現

システムの組合せ構造を論じる際の数学的道具として、層混合行列(LM 行列)とその正準形という概念を説明しよう。より詳しくは[3][6]を見られたい。

前節の電気回路の例で見たように、システムを記述する方程式は保存則を表す構造方程式と個々の素子特性を表す構成方程式に分類される。そして、前者の方程式の係数は素子の結合状態を表す接続係数であって ± 1 のような正確な数であるのに対し、後者の方程式の係数は抵抗値などの物理パラメータである。このような状況を数学的に表現するために次のような行列のクラスを考える。

一般に $K \subseteq F$ を体とし、 F 上の $m \times n$ 行列 A が(その行を適当に並べ換えたときに)

$$A = \begin{pmatrix} Q \\ T \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

ただし

(L1) Q は K 上の $m_Q \times n$ 行列。

(L2) T は F 上の $m_T \times n$ 行列でその非零要素全体は K 上代数的独立。

の形($m_Q + m_T = m$)であるとき、 A を(K に関する)層混合行列(layered mixed matrix)、略して LM 行列という。

ここでは基礎体を一般的に K としているが、応用上は有理数体あるいは有理関数体の場合を考えれば十分である。前節の電気回路を記述する行列 $A^{(1)}$ 、 $A^{(2)}$ は(素子特性を表す方程式に適当な超越数を乗じて条件(L2)を満たすようにできるので)本質的に LM 行列であると見なせる。

† 行列 A が与えられたとき、列集合 C の部分集合でそれに対応する A の列ベクトルが 1 次独立であるようなものの全体を \mathcal{I} とすると、(i) $\emptyset \in \mathcal{I}$ 、(ii) $I \subseteq J \in \mathcal{I}$ ならば $I \in \mathcal{I}$ 、(iii) $I \in \mathcal{I}$ 、 $J \in \mathcal{I}$ 、 $|I| < |J|$ ならばある $x \in J - I$ が存在して $I \cup \{x\} \in \mathcal{I}$ が成り立つ。一般に、有限集合 C とその部分集合の族 \mathcal{I} の対 (C, \mathcal{I}) でこの性質をもつものをマトロイドと呼ぶ[2]。

上の形の LM 行列 A に対して、二つの置換行列 P_r, P_c と K 上の m_0 次正則行列 S による

$$P_r \begin{pmatrix} S & O \\ O & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q \\ T \end{pmatrix} P_c \quad (4.2)$$

の形の許容変換を考える。この変換によって A から得られる行列 \bar{A} は A と LM 同値であるということにする(変換後の行列 \bar{A} も LM 行列であることに注意)。許容変換は、 Q の部分が空($m_0=0$)の場合には、行と列の並べ換えだけによる変換(2.2)に帰着する。

許容変換(特に正則行列 S による Q の行変換)は数式表現のもつ自由度に対応している。例えば、前節の例題の行列 $A^{(1)}, A^{(2)}$ は互いに LM 同値である。LM 同値性が数式表現の恣意性を吸収する。したがって、LM 同値類の性質が数式表現によらない不変な性質である。

我々は不変な階層分解(=許容変換の下でのブロック三角化)を求めているのであるから、前節最後に述べた指針に従い、 T の非零構造と Q のマトロイド構造に着目すべきである。 A の列集合 C 上の集合関数 ρ, τ, γ を導入する。 $J \subseteq C$ に対し、 $\rho(J)$ は行列 Q の列 J に対応する部分行列 $Q[J]$ の階数、 $\tau(J)$ は $T[J]$ の階数、 $\gamma(J)$ は $T[J]$ の非零行数である。すなわち、

$$\begin{aligned} \rho(J) &= \text{rank } Q[J], & \tau(J) &= \text{rank } T[J], \\ \Gamma(J) &= \{i \mid \text{ある } j \in J \text{ に対して } T_{ij} \neq 0\}, \\ \gamma(J) &= |\Gamma(J)|. \end{aligned}$$

以下に示すように、 C 上の集合関数

$$p(J) = \rho(J) + \gamma(J) - |J|$$

が重要である。 ρ が Q のマトロイド構造を、 γ が T の非零構造を表現しており、 p は許容変換の下での「不変量」になっている。これらの関数 ρ, τ, γ, p はすべて劣モジュラ関数である。すなわち、

$$f(I \cup J) + f(I \cap J) \leq f(I) + f(J), \quad I, J \subseteq C \quad (4.3)$$

のような不等式を満たす。

LM 行列の階数は次の定理 4.1 のように表される。とくに、 p の最小値による特徴付け(4.6)が重要である。これは 2 部グラフの最大マッチングと最小被覆について J. Egerváry, P. Hall, D. König, O. Ore, R. Rado などの名を冠して呼ばれる著名な最大・最小定理の行列代数への一般化である。定理 4.1 で $\rho=0$ の場合がその定理(証明中の(4.7)式)に一致する。

定理 4.1

A を LM 行列とするとき、

$$\text{rank } A = \max\{\rho(J) + \tau(C - J) \mid J \subseteq C\}, \quad (4.4)$$

$$\text{rank } A = \min\{\rho(J) + \tau(J) - |J| \mid J \subseteq C\} + |C|, \quad (4.5)$$

$$\text{rank } A = \min\{\rho(J) + \gamma(J) - |J| \mid J \subseteq C\} + |C|. \quad (4.6)$$

(略証) A が正方であるとして行列式の Laplace 展開を考える:

$$\det A = \sum_{J \subseteq C} \pm \det Q[J] \cdot \det T[C-J].$$

T の非零要素の代数的独立性により、「 A が正則 \Leftrightarrow ある J が存在して $Q[J]$ と $T[C-J]$ がともに正則」が成り立つ。一般の A に対しては、その正方部分行列にこの議論を適用して(4.4)を得る。(4.4)と(4.5)の右辺同士が等しいことは、マトロイド理論[2]における「合併マトロイドのランクの表式」である。(4.5)と(4.6)の右辺同士が等しいことは、上述の Hall-Ore の最大・最小定理

$$\tau(J) = \min\{\gamma(I) - |I| \mid I \subseteq J\} + |J| \quad (4.7)$$

と ρ の単調性を用いて

$$\begin{aligned} & \min\{\rho(J) + \tau(J) - |J| \mid J \subseteq C\} \\ &= \min\{\rho(J) + \gamma(I) - |I| \mid I \subseteq J \subseteq C\} \\ &= \min\{\rho(I) + \gamma(I) - |I| \mid I \subseteq C\} \end{aligned}$$

のように示せる。 ■

この定理によれば、拡大体 F 上の LM 行列 A の階数が部分体 K 内の四則演算とグラフ操作で効率的に ($m \approx n$ として $O(n^3 \log n)$) 計算できる。このおかげで、LM 行列は大規模システムの組合せ構造を解析する実的な道具となる。

我々の求めているブロック三角化は対角ブロックが階数条件(第2節の条件 B3)を満たさねばならない。一方、(4.6)のように、階数は p の最小値で特徴付けられる。とすれば、 p の最小値を与えるものの族

$$L = \{J \subseteq C \mid \rho(J) \leq p(I), \forall I \subseteq C\}$$

に着目することは自然であろう。 p が劣モジュラであることにより、 L は集合束 $P(C) = 2^C$ の部分束を成す。詳細は付録に説明するが、この部分束 L によって許容変換の下での最も細かいブロック三角分解が一意的に定まる。これは LM 行列の組合せ論的正準形(combinatorial canonical form), 略して CCF と呼ばれる。

定理 4.2 [組合せ論的正準形, CCF]

LM 行列 A に対して、以下の条件を満たす行列 \bar{A} が存在する。

- (a) \bar{A} は A と LM 同値である。
- (b) \bar{A} は(条件 B1~B3 を満たす)ブロック三角形である。
- (c) \bar{A} はそのようなものの中で最も細かいブロック三角化を与える。 ■

組合せ論的正準形(CCF)の定める分解の一意性(c)によって、「部分システム」と「階層構造」という概念が数式表現によらない不変な性質として定義されることになる。すなわち、CCF の対角ブロックが「部分システム」であり、CCF の半順序が「階層構造」である。前節の行列 $A^{(1)}, A^{(2)}, \bar{A}^{(2)}$ は互いに LM 同値であるが、実は、 $\bar{A}^{(2)}$ が正準形 CCF である。したがって、図 11 の半順

序が例題の電気回路の不変な階層構造である(と解釈する)。

マトロイド理論の成果を利用すると、CCF を効率的に求める算法を構成することができる。まず、算法の大きな流れを示すと、 A が正則の場合には次のようになる。

CCF を求める算法の大略(A が正則の場合)

- 1) $Q[J]$ と $T[C-J]$ がともに正則であるような $J \subseteq C$ を見出す(A が正則ならば、定理 4.1 の(4.4)により、このような J が存在する)。
- 2) $Q[J]$ の逆行列を S として

$$A' = \begin{pmatrix} S & O \\ O & I \end{pmatrix} A$$

とおく。

- 3) A' の DM 分解を求める。 ■

上の 1) はマトロイド理論において「合併マトロイドの基を求める問題」として知られる問題であり、部分体 K 内の四則演算とグラフ操作で効率的に ($m = O(n)$ として $O(n^3 \log n)$ で) 計算できる。3) の DM 分解は第 2 節に述べた算法による。

(4.1) の形の一般の LM 行列 $A = \begin{pmatrix} Q \\ T \end{pmatrix}$ に対して、その正準形 \bar{A} を求める算法の詳細は以下のとおりである。 R_T を T の行集合、 C_Q を A の列集合 C のコピー ($j \in C$ に対応する C_Q の元を j_Q と書く) として、 $V = R_T \cup C_Q \cup C$ を点集合、 $B = B_T \cup B_C \cup B^* \cup M$ を枝集合にもつ有向グラフ $G = (V, B)$ を考える。ただし

$$B_T = \{(i, j) | i \in R_T, j \in C, T_{ij} \neq 0\},$$

$$B_C = \{(j_Q, j) | j \in C\},$$

であり、 B^* は C_Q から C_Q へ、 M は C から $R_T \cup C_Q$ へ向かう枝の集合であって算法中で定義・更新される。 M の端点の集合を $\partial M (\subseteq V)$ と書く。 P は $m_Q \times n$ 行列 (2 次元配列) であり、その列集合を C と、行集合を (与えられた) 行列 Q の行集合 R_Q と同一視する。また、 $Base$ は大きさ m_Q の 1 次元配列で、 R_Q から $C \cup \{0\}$ への対応を表す。

CCF を求める算法の詳細

Step 1) $M := \phi$; $Base[i] := 0$ ($i \in R_Q$):

$$P[i, j] := Q_{ij} \quad (i \in R_Q, j \in C);$$

Step 2) $I := \{i \in C | i_Q \in \partial M \cap C_Q\}$;

$$J := \{j \in C - I | Base[i] = 0 \Rightarrow P[i, j] = 0\};$$

$$S^+ := (R_T - \partial M) \cup \{j_Q \in C_Q | j \in C - (I \cup J)\};$$

$$S^- := C - \partial M;$$

$$B^+ := \{(i_Q, j_Q) | h \in R_Q, j \in J, P[h, j] \neq 0, i = Base[h]\};$$

もし G 上で S^+ から S^- への有向道が存在するならば Step 3 へ、存在し

ないならば ($S^+ = \phi$ や $S^- = \phi$ の場合も) Step 4 へ進む;
 Step 3) S^+ から S^- への最短路上の枝集合を L とする;
 $M := (M - L) \cup \{(j, i) | (i, j) \in L \cap B_T\} \cup \{(j, j_0) | (j_0, j) \in L \cap B_C\}$;
 もし L の始点 ($\in S^+$) が C_0 の点 j_0 ならば {

$Base[h] = 0$ かつ $P[h, j] \neq 0$ なる h を求める;

$Base[h] := j$; $w := 1/P[h, j]$;

$P[k, l] := P[k, l] - w \times P[k, j] \times P[h, l]$

($h \neq k \in R_0, l \in C$):

すべての $(i_0, j_0) \in L \cap B^+$ に対して (S^+ から S^- への順に) {

$i = Base[h]$ なる h を求める;

$Base[h] := j$; $w := 1/P[h, j]$;

$P[k, l] := P[k, l] - w \times P[k, j] \times P[h, l]$

($h \neq k \in R_0, l \in C$):

Step 2 に戻る;

Step 4) G 上で S^+ から有向道で到達できる点の集合を V_∞ , S^- へ到達できる点の集合を V_0 とする;

G から $V_0 \cup V_\infty$ の点を取り除いたグラフにおける強連結成分を $\{V_k\}$ とする;

$C_0 := C \cap V_0$; $C_\infty := C \cap V_\infty$;

すべての k に対して $C_k := C \cap V_k$;

C_k のうち空でないものを $\{C_k | k=1, \dots, b\}$ とする (ただし, $1 < k$ ならば C_k から C_i に有向道が存在しないように番号づける);

$R_0 := (R_T \cap V_0) \cup \{i \in R_0 | Base[i] \in C_0\}$;

$R_\infty := (R_T \cap V_\infty) \cup \{i \in R_0 | Base[i] \in C_\infty\} \cup \{i \in R_0 | Base[i] = 0\}$;

$R_k := (R_T \cap V_k) \cup \{i \in R_0 | Base[i] \in C_k\}$ ($k=1, \dots, b$);

$$\bar{A} := \begin{bmatrix} P \\ T \end{bmatrix}.$$

上の算法の終了時に $|M| = \text{rank } A$ であり, \bar{A} が CCF. ($R_0; R_1, \dots, R_b$; R_∞) が行集合の分割, ($C_0; C_1, \dots, C_b; C_\infty$) が列集合の分割を与える. Step 3 の P の更新においては非零要素だけを扱うようにするとよい (例えば, $Base[h] = 0$ かつ $j \in I \cup J$ ならば $P[h, j] = 0$ である). 変換行列 S を求めるには, Step 1 で $m_0 \times m_0$ の 2 次元配列 S を単位行列に初期化しておき, Step 3 で P と同時に $S[k, l] := S[k, l] - w \times S[k, j] \times S[h, l]$ ($h \neq k \in R_0, l \in R_0$) のように更新すればよい.

LM 行列は代数的・組合せ論的に見て種々の良い性質を有している[5][6]. 上に述べたものに加えて, 例えば次のようなものがある.

・正則な LM 行列の行列式は T の非零要素に関する K 上の多項式であるが,

LM 行列の既約性(=許容変換(4.2)による分解不能性)は、行列式の多項式としての既約性(=素因子への分解不能性)を意味する。したがって、「部分システム」は種々の代数的既約性をもつ。

- 正則な LM 行列の既約性は、逆行列の全要素が非零であるという「入出力関係の既約性」を意味する。

5 おわりに

本稿では、離散システムの組合せ論的構造解析の一例として、数式表現に依存しない階層構造の抽出法を考察した。システムを記述する変数の組は与えられているという前提の下に、方程式の書き方によらない階層構造を探り、LM 行列の正準形 CCF に到達した。しかし、第3節でも触れたように、システムを記述する変数の選び方にも任意性がある。むしろ変数選択の方がより大きな問題である。これについては、機会を改めて考察したい。

グラフ理論的な手法を大規模システムの解析に利用する試みは今やほとんどすべての工学分野に見られるが、制御理論においても1970年代中頃から「構造的アプローチ」の名で研究されてきた。LM 行列の概念は(基礎体 K を有理関数体として)動的システムの構造解析にも有用である。この話題については [3][5][7] を参照されたい。

付録

正準形 CCF の構成的証明の概略

LM 行列の正準形 CCF の一意存在の定理 4.2 の証明の概略を述べる(より詳しい証明が [4] にある)。以下の議論は数学的な意味での構成法であって、実際に CCF を求めるためのアルゴリズムは第4節に述べたものである。

関数 ρ の最小値を与えるものの族 L は集合束 $P(C)$ の部分束である。 L の一つの極大(昇)鎖

$$X_0 (= \min L) \subset X_1 \subset \dots \subset X_b (= \max L)$$

をとり、

$$C_0 = X_0, \quad C_k = X_k - X_{k-1} \quad (k=1, \dots, b), \quad C_\infty = C - X_b$$

とおくとき $\{C_k | k=1, \dots, b\}$ は極大鎖によらず一意的に定まる。 $1 \leq k, l \leq b$ に対し、

$$X \in L, C_l \subseteq X \Rightarrow C_k \subseteq X$$

が成立するときに $C_k < C_l$ と定めることにより、 $\{C_k | k=1, \dots, b\}$ の上に半順序 $<$ を定義する。さらに、

$$C_0 \neq \phi \text{ なら } C_0 < C_k \quad (k=1, \dots, b),$$

$$C_\infty \neq \phi \text{ なら } C_k < C_\infty \quad (k=1, \dots, b)$$

という関係も付け加えて(その推移閉包として)得られる

$$\{C_0, C_\infty\} \cup \{C_k | k=1, \dots, b\}$$

上の半順序を再びくと呼ぶ。次の記号を導入しておく：

$$\langle C_k \rangle = \cup \{C_i | C_i \preceq C_k\}.$$

劣モジュラ関数 ρ, ρ, γ の L への制限はモジュラである(すなわち(4.3)で等号が成り立つ)。 f を L への制限がモジュラであるような C 上の劣モジュラ関数とする ($f = \rho, \rho, \gamma$ と考えてよい)。 L の一つの極大鎖に沿って C_k 上の集合関数 f_k を

$$f_k(X) = f(X \cup X_{k-1}) - f(X_{k-1}), \quad X \subseteq C_k$$

($k=1, \dots, b$) で定義すると、 f_k は劣モジュラであり、 $\{f_k | k=1, \dots, b\}$ は極大鎖のとり方によらずに定まって、

$$f_k(X) = f(X \cup \langle C_k \rangle) - f(\langle C_k \rangle), \quad X \subseteq C_k$$

と表される。

LM 行列 A の許容変換(4.2)は、もう一つの置換行列 P_T を含んだ

$$P_T \begin{pmatrix} S & O \\ O & P_T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q \\ T \end{pmatrix} P_C$$

の形の変換と同等である。以下、この四つの行列 P_C, S, P_T, T の定め方を順次述べる。一般に行列の行集合を $\text{Row}(\cdot)$ と表す。

[P_C の定め方]

L から上述のようにして定まる C の分割を $(C_0; C_1, \dots, C_b; C_\infty)$ とする(ただし C_0 と C_∞ は空集合である可能性がある)。ブロックの添字はブロック間に定義されている半順序 \preceq に矛盾しないようにつけられていること、すなわち、

$$C_k \preceq C_l \Rightarrow k \leq l,$$

に注意。このとき、 P_C は、 A の列を $C_0, C_1, \dots, C_b, C_\infty$ の順になるように並べ換えるようにとる(各ブロック内の並べ方は任意)。

[S の定め方]

$Q_0 = Q P_C$ とおく。 $Q_0[\text{Row}(Q_0), C_0]$ は、 $\rho(X_0)$ 本の独立な行ベクトルを含み、他の行ベクトルはこれらのベクトルの K 上の 1 次結合で表せる。すなわち、ある $S_0 \in \text{GL}(m_0, K)$ とある R_{00} が存在して、 $Q_1 = S_0 Q_0$ が次の条件を満たす。

$$Q_1[\text{Row}(Q_1) - R_{00}, C_0] = O, \text{ かつ}$$

$$\text{rank } Q_1[R_{00}, C_0] = |R_{00}| = \rho(X_0).$$

次に、 $Q_1[\text{Row}(Q_1), C_0 \cup C_1]$ は $\rho(X_1)$ 本の独立な行ベクトルを含むから、ある $S_1 \in \text{GL}(m_0, K)$ とある $R_{00}, R_{01} (R_{00} \cap R_{01} = \emptyset)$ が存在して、 $Q_2 = S_1 Q_1$ が次の条件を満たす。

$$Q_2[\text{Row}(Q_2) - R_{00}, C_0] = O.$$

$$Q_2[\text{Row}(Q_2) - (R_{00} \cup R_{01}), C_0 \cup C_1] = O; \text{ かつ}$$

$$\text{rank } Q_2[R_{00}, C_0] = |R_{00}| = \rho(X_0).$$

$$\text{rank } Q_2[R_{01}, C_1] = |R_{01}| = \rho(X_1) - \rho(X_0).$$

ここで、「 $Q_2[R_{00}, C_1]$ の非零行ベクトルは $Q_2[R_{01}, C_1]$ の行ベクトル全体と1次独立である」と仮定してよい。

このような掃出し行演算を続けていくことにより、次のことが分かる： $S \in GL(m_0, K)$ を適当に選べば $\bar{Q} = SQP_c$ に対して、 $\text{Row}(\bar{Q})$ の分割 $(R_{00}; R_{01}, \dots, R_{0b}; R_{0\infty})$ が存在して

$$\bar{Q}[R_{01}, C_k] = O \quad (0 \leq k < l \leq \infty);$$

かつ

$$\text{rank } \bar{Q}[R_{00}, C_0] = |R_{00}| = \rho(X_0).$$

$$\text{rank } \bar{Q}[R_{0k}, C_k] = |R_{0k}| = \rho(X_k) - \rho(X_{k-1}) \quad (k=1, \dots, b),$$

$$|R_{0\infty}| = m_0 - \rho(X_b).$$

さらに、「 $0 \leq k < l \leq \infty$ なる任意の k, l に対して、 $\bar{Q}[R_{0k}, C_l]$ の非零行ベクトルは $\bar{Q}[R_{0l}, C_l]$ の行ベクトル全体と1次独立である」と仮定してよい。ここで、 $\rho(X_k) - \rho(X_{k-1})$ が極大鎖のとり方によらずに定まることに注意。

[P_T の定め方]

$\text{Row}(T)$ の分割 $(R_{T0}; R_{T1}, \dots, R_{Tb}; R_{T\infty})$ を

$$R_{T0} = \Gamma(X_0),$$

$$R_{Tk} = \Gamma(X_k) - \Gamma(X_{k-1}) \quad (k=1, \dots, b),$$

$$R_{T\infty} = \text{Row}(T) - \Gamma(X_b)$$

によって定義すると、これは極大鎖のとり方によらずに定まる。明らかに T は(この分割に関して)ブロック三角化されているので、適当な置換行列 P_T に対して $\bar{T} = P_T T P_c$ は陽にブロック三角化されている： $\bar{T}[R_{Tl}, C_k] = O (0 \leq k < l \leq \infty)$ 。

[P_r の定め方]

\bar{Q} と \bar{T} はすでにブロック三角形である。

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} \bar{Q} \\ \bar{T} \end{pmatrix}$$

として $R_k = R_{0k} \cup R_{Tk} (k=0, 1, \dots, b, \infty)$ とおくと、 \bar{A} は行集合の分割 $(R_0; R_1, \dots, R_b; R_\infty)$ と列集合の分割 $(C_0; C_1, \dots, C_b; C_\infty)$ に関してブロック三角化されている： $\bar{A}[R_i, C_k] = O (0 \leq k < i \leq \infty)$ 。 \bar{A} の行を置換行列 P_r によって適当に並べ換えれば、 $P_r \bar{A}$ は陽にブロック三角化される。この \bar{A} がCCFである。 \bar{A} の対角ブロックが第2節の条件B2, B3を満たすことは定理4.1を用いて示すことができる。 \bar{A} の非零構造の定める半順序は L の定める半順序 \prec に一致している。(付録終)

[参考文献]

- [1] Iri, M., Applications of matroid theory, in Mathematical Programming—State of the Art (edited by A. Bachem, M. Grötschel and B. Korte), Springer-Verlag, Berlin, 1983, 158-201.
 [2] 伊理正夫, 藤重悟, 大山達雄, グラフ・ネットワーク・マトロイド, 産業図書, 東京,

- 1986.
- [3] Murota, K., *Systems Analysis by Graphs and Matroids — Structural Solvability and Controllability, Algorithms and Combinatorics 3*, Springer-Verlag, Berlin, 1987.
 - [4] 室田一雄, 方程式系のブロック三角化について——層混合行列の組合せ論的正準形に関する主定理の証明の詳細, グラフ理論の数値計算への応用, 統計数理研究所共同研究報告書, 61-共会-14, 1987, 13-31.
 - [5] Murota, K., Some recent results in combinatorial approaches to dynamical systems, *Linear Algebra and Its Applications*, 122~124(1989), 725-759.
 - [6] 室田一雄, 混合行列の正準形とその応用, 日本数学会応用数学科会特別講演(1990年4月, 岡山理科大), 1990, 222-241.
 - [7] 室田一雄, マトロイドとシステム解析, 離散構造とアルゴリズム(藤重悟編, 日本応用数理学会離散システム研究部会, 近代科学社, 東京, 1992.

[Abstract]

Hierarchical decompositions of discrete systems — Exploiting invariant structures by matroid.

Kazuo Murota, Department of Mathematical Engineering and Information Physics, Faculty of Engineering, University of Tokyo.

Bulletin of the Japan Society for Industrial and Applied Mathematics 3 (1991), 229-248.

Hierarchical decompositions of discrete physical/engineering systems are considered by means of graph and matroid theory. First, a graph-theoretic method, called the Dulmage-Mendelsohn(DM-)decomposition, is described. Though the DM-decomposition is unique from the graph-theoretic viewpoint, the resulting hierarchy cannot be regarded as a physically inherent structure since it varies with mathematical descriptions employed. This critical observation leads to a new method based on matroid theory for systems analysis. A class of matrices, layered mixed(LM-)matrices, is introduced as a mathematical tool for describing the combinatorial structure of discrete systems. An LM-matrix has a canonical block-triangular decomposition, called the combinatorial canonical form(CCF), which reveals the "invariant" hierarchy. The CCF is an extension of the DM-decomposition and can be computed by a fast algorithm.

(1991年1月17日受付)