混合行列の話[*]

室田 一雄[†]

1　はじめに

「数理工学への誘い」の最終回は行列の話です．知っている人も多いと思いますが，行列というのは，

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -2 & 3 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 \\ -2 & 3 & -2 \end{bmatrix}$$

のように，数を四角に並べたものです．横の並びを「行」，縦の並びを「列」といい，全体が「行列」です．

普通の線形代数の講義では，行列が与えられたとしてその性質が論じられます．たとえば，一次変換，ランク（階数），固有値，ジョルダン標準形など，いろいろなことを教わります．これらの概念を正しく理解すれば，線形代数をマスターしたことになります．

でも，こんな疑問をもったことはありませんか？

- 「行列があったとしましょう」といって話が始まるけれど，そもそも，世の中には，どんな行列があるのだろう？
- ランクや固有値などいろいろな概念が定義されているけれど，どんな場合にどの性質が役にたつのだろう？
- ランクや固有値などはどうやって計算するのだろう？

上に挙げた疑問点は，要するに,「線形代数と外界との関係はどうなっているのだろう？」という興味の現れです．ここで外界というは，線形代数の教科書の外の世界を指しています．社会現象や自然現象でも工学の問題でも，あるいは，コンピュータでも構いません．

もし，あなたがこのようなこと—数学と外界との関わり—に興味があるならば，数理工学の世界をのぞいてみませんか？

[*]2005 年夏学期「応用数理学」資料；混合行列の話，「数理工学への誘い」，東京大学工学部計数工学科数理情報工学コース編，日本評論社, 2002, pp. 139–149, の原稿を修正

[†]東京大学大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻

今回は,「混合行列」のお話です．まず，簡単な電気回路の例を使って「混合行列」というものを考える理由を説明します．その後で，その数学的な性質として，ランクの公式を述べます．この公式は，線形代数というよりも，むしろ，組合せ論的な色彩の強いものです．

「行列があったとしましょう」から話を始めるのではなく,「物があったとしましょう」から話を始めて,「どんな行列がでてきますか」,「どんな性質を知りたいですか」に進みます．そして，最後に,「それをどうやって計算するのですか」に答えましょう．外界から行列を眺めて，数理的考察を巡らすことが今回の目標です．

2　電気回路の行列

電気回路があったとして，それを記述する方程式にどのような行列が現れるかを見てみましょう．電気回路のようなシステム（専門用語では集中定数系といいます）を記述するときには，

1. それぞれの素子（部品）がどのような特性をもっているか，
2. 素子が相互にどのようにつながっているか，

の二つのことに着目して方程式を作ることになります．前者は，オームの法則などを表現するもので，構成方程式 (constitutive equation) と呼ばれます．他方，後者は，電流や電圧の保存則を表現するもので，構造方程式 (structural equation) と呼ばれます．

さて，図 1 のような電気回路があったとします．この回路は 5 つの素子からできています．図に で示した 2 つの素子は，抵抗値が r_1, r_2 の抵抗で，それぞれの電流 I_1, I_2 と電圧 V_1, V_2 の間には，オームの法則

$$V_1 = r_1 I_1, \qquad V_2 = r_2 I_2$$

が成り立つことにしましょう．図の中央の は電流源で，その電流 I_4 は第 2 の抵抗を流れる電流 I_2 に比例

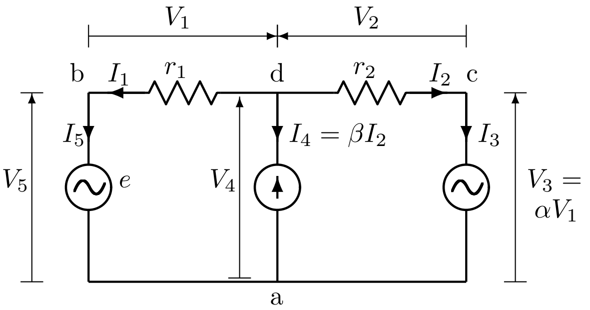

図 1: 電気回路の例

するように制御されていて，β を比例定数として

$$I_4 = \beta I_2$$

で与えられるとしましょう．図の左右にある ㉤ は電圧源です．左側はその電圧 V_5 が関数 e によって与えられる独立電源であって，

$$V_5 = -e$$

であり，右側の電圧 V_3 は第 1 の抵抗の電圧 V_1 に比例するように制御されていて，α を比例定数として

$$V_3 = \alpha V_1$$

で与えられるとしましょう．以上の 5 つの方程式が，この回路の構成方程式です．

構造方程式は，電流と電圧の保存則を表現するものです．点 a における電流の保存より

$$I_3 + I_4 + I_5 = 0$$

が得られ，同様に，点 b, c における電流の保存より

$$I_1 - I_5 = 0, \qquad I_2 - I_3 = 0$$

が得られます．電流の保存則はこの 3 つの方程式で完全に表現されており，たとえば，点 d における電流の保存を表す式 $I_1 + I_2 + I_4 = 0$ は上の 3 式を加え合わせることによって導かれるので，改めて書く必要はありません．電圧の保存則の方は，左右のそれぞれの正方形の閉路に沿った電圧の和がゼロになるという条件

$$V_1 - V_4 + V_5 = 0, \qquad V_2 + V_3 - V_4 = 0$$

で表現されます．

以上の方程式をすべて集めると，ベクトル $\boldsymbol{x} = [I_1, \ldots, I_5, V_1, \ldots, V_5]^{\mathrm{T}}$ に関する $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の形の方程式系

$$\left[\begin{array}{ccccc|ccccc}
0 & 0 & 1 & 1 & 1 & & & & & \\
1 & 0 & 0 & 0 & -1 & & & & & \\
0 & 1 & -1 & 0 & 0 & & & & & \\
 & & & & & 1 & 0 & 0 & -1 & 1 \\
 & & & & & 0 & 1 & 1 & -1 & 0 \\ \hline
r_1 & & & & & -1 & & & & \\
 & r_2 & & & & & -1 & & & \\
 & & 0 & & & \alpha & & -1 & & \\
 & \beta & & -1 & & & & & 0 & \\
 & & & & 0 & & & & & -1
\end{array}\right]
\left[\begin{array}{c}
I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \\ I_5 \\ \hline V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \\ V_5
\end{array}\right]
=
\left[\begin{array}{c}
0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \hline 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ e
\end{array}\right]$$

が得られます．上の 10×10 行列 A が，図 1 の電気回路を記述する行列です．上半分が構造方程式，下半分が構成方程式を表しています．なお，空白の部分の要素はゼロです．

線形代数の教科書にでてくる行列と比べて，上の行列 A はつぎのような特徴をもっています．

- 行列の大きさ（行や列の数）が大きい．
- 行列の要素の中にゼロのものが多い．

実は，この 2 つの性質は，現実問題から生じる行列に共通する特徴です．何万もの素子からなる電気回路では，行列の行数や列数も何万という大きさになりますが，行列要素のほとんどはゼロになります．一言でいえば，現実の行列は，大規模疎行列なのです.「疎」というのは,「過疎地帯」とかいうときの「疎」と同じで,非ゼロ要素が疎ら (まばら) である状態を意味します.「疎」の反対は「密」です．英語では，疎行列=sparse matrix, 密行列=dense matrix です．ただし，疎行列と密行列の区別は数学的に厳密なものではありません．

さて，私たちは，この係数行列 A についてどんな性質を知りたいのでしょうか．ここでは，電気回路が一意可解かどうか，すなわち，任意の e に対して電流 $I_1 \sim I_5$ と電圧 $V_1 \sim V_5$ が一意的に確定するかどうかを知りたいとしましょう．線形代数によれば，

- 行列 A が正則である，
- 行列 A のランク $\operatorname{rank} A$ が 10 に等しい，
- 行列 A の行列式 $\det A$ がゼロでない，

の 3 条件がすべて同値で，これが一意可解性の条件となります．行列式を手計算で求めてみると，

$$\det A = r_2 + (1 - \alpha)(1 + \beta) r_1 \tag{1}$$

となります．したがって，この値がゼロでなければ例題の電気回路は一意可解ということになります．たとえば，$(r_1, r_2, \alpha, \beta) = (1, 1, 0.5, 1)$ のときには $\det A = 2$

なので一意可解であり，$(r_1, r_2, \alpha, \beta) = (1, 1, 1.5, 1)$ のときには $\det A = 0$ なので一意可解ではありません，

この例題では行列式を手計算で求めることによって一意可解性を判定できました．でも，A が大規模行列のときには手計算ではできそうにありません．どうやって計算したらよいのでしょうか．パラメータ r_1, r_2, α, β に数値を代入してから，数値計算パッケージを使って行列式の値を計算すればいいのでしょうか．このとき，数値計算誤差の影響を心配しなくてよいのでしょうか．あるいは，パラメータ r_1, r_2, α, β を記号のまま扱って行列式を計算するのがよいのでしょうか．このとき，どのくらい計算時間がかかるのでしょうか．大規模疎行列という状況に対して，どう対処するのがよいのでしょうか．

「どうやって計算するか」の答えがよく分からないので，もう一度,「どんな行列がでてくるか」という問題に戻ることにして，行列をよく観察してみましょう．

3　2種類の数

行列の要素をゼロと非ゼロに分類することによって疎行列と密行列という区別が得られました．ここでは，さらに非ゼロ要素を 2 種類に分類しましょう．

上の行列 A は 22 個の非ゼロ要素をもっていますが，そのうちの 4 個は素子の物理的特性を表すパラメータ r_1, r_2, α, β であり，残りは 1 と -1 が 9 個ずつです．このように，非ゼロ要素は $\{1, -1\}$ という定数と $\{r_1, r_2, \alpha, \beta\}$ というパラメータに分類されます．パラメータがすべて構成方程式に含まれ，構造方程式（保存則）は定数によって記述されていることに着目してください．

個々の電気回路においては，パラメータには具体的な数値が与えられています．たとえば，$(r_1, r_2, \alpha, \beta) = (1, 1, 0.5, 1)$ という具合です．このとき二つの抵抗の値 r_1, r_2 はともに 1Ω に等しいことになりますが，ここに現われた 1 は，保存則を記述する定数の 1 と同じものでしょうか？

秋葉原の電気街に行って「1Ω」と書かれた抵抗を 2 個買ったとしましょう．家に帰って精密に抵抗値を測定してみれば，おそらく，1Ω には近いけれど等しくない値（たとえば 1.02Ω と 0.99Ω といった感じ）になるのではないでしょうか．つまり，$r_1 = 1, r_2 = 1$ というときの 1 は公称値（たてまえ）であって，実際の値には誤差が含まれていると考えるべきものでしょう．これとは対照的に，保存則の記述に現われる 1 は全く誤差を持たない本当の 1 です．

以上の分類をまとめると

$$\begin{cases} \text{ゼロ} \\ \text{非ゼロ} \begin{cases} \text{定数（誤差を含まない正確な数）} \\ \text{パラメータ（誤差を含む公称値）} \end{cases} \end{cases}$$

のようになります．

電気回路の例では，定数は ± 1 に限られていました．これは，電気回路における保存則が素子の接続関係（グラフ構造）で決まっているからです．化学反応においては ± 1 でない定数も出現します．たとえば，水の電気分解の反応式は

$$2 \cdot \mathrm{H_2O} = 2 \cdot \mathrm{H_2} + 1 \cdot \mathrm{O_2}$$

ですが，水 $\mathrm{H_2O}$, 水素 $\mathrm{H_2}$，酸素 $\mathrm{O_2}$ のモル数を x, y, z とすると，保存則は

$$-2x + 2y + z = 0$$

となり，係数に ± 2 が現われます．

4　混合行列の定義

非ゼロ要素の分類に応じて，電気回路の行列 A を定数の部分 Q とパラメータの部分 T の和として $A = Q + T$ の形に表現することができます．ここで，

$$Q = \left[\begin{array}{ccccc|ccccc}
0 & 0 & 1 & 1 & 1 & & & & & \\
1 & 0 & 0 & 0 & -1 & & & & & \\
0 & 1 & -1 & 0 & 0 & & & & & \\
 & & & & & 1 & 0 & 0 & -1 & 1 \\
 & & & & & 0 & 1 & 1 & -1 & 0 \\
\hline
0 & & & & & -1 & & & & \\
 & 0 & & & & & -1 & & & \\
 & & 0 & & & 0 & & -1 & & \\
 & 0 & & -1 & & & & & 0 & \\
 & & & & 0 & & & & & -1
\end{array}\right],$$

$$T = \left[\begin{array}{ccccc|ccccc}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & & \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & & \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & & \\
 & & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
r_1 & & & & & 0 & & & & \\
 & r_2 & & & & & 0 & & & \\
 & & 0 & & & \alpha & & 0 & & \\
 & \beta & & 0 & & & & & 0 & \\
 & & & & 0 & & & & & 0
\end{array}\right]$$

です．このように，定数部分とパラメータ部分が分離できる行列を混合行列 (mixed matrix) と呼びます．

混合行列は，物理的（あるいは常識的）な議論から自然に導かれるものですが，代数学の初歩的な概念を使って数学的に定義することができます．

代数学では，加減乗除のできる集合を体（たい）と呼びます．たとえば，有理数の全体 $\mathbf{Q}$ や実数の全体 $\mathbf{R}$ は典型的な体です．整数の全体 $\mathbf{Z}$ は体ではありません．$\boldsymbol{F}$ を体，$\boldsymbol{K}$ をその部分体とします．$\boldsymbol{F}$ の元 $t_1, \ldots, t_m$ は，お互いの間に $\boldsymbol{K}$ 上の代数的従属関係[1] がないときに $\boldsymbol{K}$ 上代数的独立であると呼ばれます．

混合行列の定義を述べましょう．$\boldsymbol{F}$ の元を要素とする行列 A を考えます．A が，条件

- **(Q)** Q は $\boldsymbol{K}$ の元を要素とする行列，
- **(T)** T は $\boldsymbol{F}$ の元を要素とする行列で，その非ゼロ要素の全体は $\boldsymbol{K}$ 上で代数的独立，

を満たす二つの行列 Q と T の和の形

$$A = Q + T \tag{2}$$

に書けるとき，$(\boldsymbol{K}, \boldsymbol{F})$ に関する混合行列といいます．

例題の行列 A に対しては，r_1, r_2, α, β を独立パラメータと仮定して，これを変数とする有理数係数有理式の全体を $\boldsymbol{F}$ とすると，A は $(\mathbf{Q}, \boldsymbol{F})$ に関する混合行列になります．

条件 (T) について補足的考察をしましょう．r_1, r_2, α, β を独立パラメータとみれば条件 (T) が満たされることは当然なのですが，個々の電気回路においては，パラメータに具体的な数値が与えられているので，代数的独立性が保たれているかどうか心配になります．数学的には， $r_1 = r_2 = 1$ も考えうるので，代数的独立性が破られる場合もあります．しかし「秋葉原の電気街 $\cdots$」の段落で議論したように，パラメータの値は誤差を含んだ公称値にすぎませんから，現実の状況では，パラメータの値は互いに代数的独立になると考えてよいのです．このとき，式 (1) の $\det A$ はゼロにはならないので，例題の電気回路は一意的に可解です．パラメータ値の代数的独立性の下での可解性を構造的可解性といいます．

5　混合行列のランク

例題の行列 A は混合行列ですから，一意可解性の判定は混合行列のランクを計算することに帰着されます．混合行列のランクを表す公式を示し,「どうやって計算するか」の答えを出しましょう．

$A = Q + T$ を $(\boldsymbol{K}, \boldsymbol{F})$ に関する混合行列とします．体 $\boldsymbol{F}$ における四則演算を用いてよいのであれば，A のランクはガウスの消去法によって簡単に計算できます．ここでの課題は，部分体 $\boldsymbol{K}$ における四則演算によって，効率良く[2]A のランクを計算する方法です．

A の行番号の集合を R, 列番号の集合を C とします．また， $I \subseteq R$ と $J \subseteq C$ に対応する A の部分行列を $A[I, J]$ と書くことにします．

補題 1: 正方形の混合行列 $A = Q + T$ が正則であるためには，$Q[I, J]$ と $T[R \setminus I, C \setminus J]$ とが正則となるような $I \subseteq R$ と $J \subseteq C$ が存在することが必要十分である．

(証明) 行列式の定義の展開式から

$$\det A = \sum_{|I|=|J|} \varepsilon(I, J) \cdot \det Q[I, J] \cdot \det T[R \setminus I, C \setminus J]$$

が得られます．ここで，$\varepsilon(I, J) = \pm 1$ です．A が正則ならば，$\det A \neq 0$ です．すると，右辺の和の中には非ゼロの項があるはずなので，$\det Q[I, J] \cdot \det T[R \setminus I, C \setminus J] \neq 0$ を満たす I, J が存在します（必要性）．逆に，右辺の和の中に非ゼロの項があれば，T の非ゼロ要素の独立性のおかげで，これが打ち消されることはないので，右辺の和の値はゼロではありません．したがって，$\det A \neq 0$ となり A は正則です（十分性）．■

上の補題から，最初のランク公式が導かれます．

定理 1: 混合行列 $A = Q + T$ に対して

$$\operatorname{rank} A = \max_{I \subseteq R, J \subseteq C} \{\operatorname{rank} Q[I, J] + \operatorname{rank} T[R \setminus I, C \setminus J]\}.$$

(証明) 行列のランクは，正則な部分行列の大きさの最大値です．補題 1 を A の部分行列に適用することで，この公式が証明できます．■

ここで，$\operatorname{rank} Q[I, J]$ は部分体 $\boldsymbol{K}$ における四則演算 (ガウスの消去法) で計算でき，$\operatorname{rank} T[R \setminus I, C \setminus J]$ は２部グラフ上のマッチング問題を解くことによって計算できることが重要です．すなわち，右辺の関数

$$f(I, J) = \operatorname{rank} Q[I, J] + \operatorname{rank} T[R \setminus I, C \setminus J]$$

は効率的に計算可能な関数です．

定理 1 を用いると，例題の電気回路の一意可解性の確認ができます．実際，$I = \{1, 2, 3, 4, 5, 7, 10\}$,

[1] $\boldsymbol{K}$ の元を係数とするある多項式 p に対して $p(t_1, \ldots, t_m) = 0$ となることをいいます．

[2]「効率良く」の正確な意味は，演算回数が行列の大きさに関する多項式で抑えられることです．

$J = \{3,4,5,7,8,9,10\}$ に対して $\mathrm{rank}\, Q[I,J] = 7$, $\mathrm{rank}\, T[R \backslash I, C \backslash J] = 3$ なので，上の定理より $\mathrm{rank}\, A \geq 10$ となります．一方，$\mathrm{rank}\, A \leq 10$ は最初から分かっているので，$\mathrm{rank}\, A = 10$ が得られます．

上の公式は，A のランクが効率的に計算可能な関数 $f(I,J)$ の最大値に等しいことを述べていますが，次の点に注意して下さい：

1. 最大値を与える (I,J) を効率良く（多項式時間で）見出すアルゴリズムを与えている訳ではない，
2. 任意の (I,J) に対して $f(I,J)$ の値を計算できるので，ランクがある値以上であることを効率良く確認する手段を与える，
3. ランクがある値以下であることを効率良く確認する手段は与えない．

上の 2 と 3 より，定理 1 は一意可解であることを効率良く確認するために有用であるが，その逆に，一意可解でないことを効率良く確認するためには役立たないことが分かります．すべての (I,J) に対して $f(I,J)$ の値を計算することは多項式時間でできないからです．

次の定理に示す第 2 のランク公式は，ランクがある値以下であることを効率良く確認する手段を与えることになります．

定理 2: 混合行列 $A = Q + T$ に対して，

$$\begin{aligned} \mathrm{rank}\, A &= \min_{I \subseteq R, J \subseteq C} \{\mathrm{rank}\, Q[I,J] - |I| - |J| \\ &\qquad \mid \mathrm{rank}\, T[I,J] = 0\} + |R| + |C|. \end{aligned}$$

(証明) 長いので省略します．文献 [1] の 141 ページにあります． ■

例題の電気回路の行列 A に対しては，$I = R$, $J = \emptyset$ が右辺の最小値 10 を与えます．実は，定理 2 の本質は，離散凸関数 [2] に関する双対性です．

定理 1 と定理 2 を合わせると，ランクがある値に等しいことを効率的に確認する手段が得られます．定理 1 の最大値を与える (I,J) と定理 2 の最小値を与える (I,J) を与えてやればよいからです．このことを，専門用語では，定理 1 と定理 2 は混合行列のランクに対する good characterization を与えていると表現します．

実は，さらに具合の良いことに，定理 1 の最大値を与える (I,J) と定理 2 の最小値を与える (I,J) を効率良く求めるアルゴリズムがあります．そのアルゴリズムはマトロイド理論というものに基づいて設計されるのですが，詳細は文献 [1] の 4.2.4 節をご覧ください．

以上で「どうやって計算するか」までのストーリーが完結しました．

6 おわりに

数理工学では，いろいろな種類のロジックを駆使して問題に接近しようとします．まず，外界にある問題をよく観察して，物理的，常識的なレベルでの考察をします．このときの推論は「正しさ」を証明できるという種類のものではなく，「妥当性」，「適切性」がポイントとなります．いったん数学モデルを設定してしまった後では，数学の論理で推論が行われ，「定理」，「証明」という形態が用いられます．そして，その数学的定理が再び外界へと飛び出して，外界の論理に照らされて「有効性」，「有用性」などが問われることとなります．ロジックの多価性が数理工学の大きな特徴と筆者は感じています．

[1] K. Murota: *Matrices and Matroids for Systems Analysis*, Springer-Verlag, Berlin, 2000.
[2] 室田一雄: 離散凸解析，共立出版, 2001.