混合行列の正準形と階層構造[*]

室田 一雄[†]

1　はじめに

工学に現れる行列は，線形代数の教科書にでてくる行列と比べて，

- 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，

という特徴をもっています．何万もの素子からなる電気回路を記述するとき，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．

大規模疎行列の解析においては，それぞれの要素の値がいくつであるかという数値的な情報に先立って，そもそもどの要素がゼロでないかという構造的な（非数値的な）情報の把握が重要になります．行列要素がゼロでないことは，工学システムの構成素子の間に結合関係があることを表しているからです．そして，非数値情報の解析には，普通の線形代数で中心となる幾何学的な見方よりも，むしろ組合せ論的な見方が有用です．

最初に，行と列の並べ換えによる行列の分解を説明し，次に，電気回路の例を用いて行列表現の非一意性と分解の不変性という問題を提起し，最後に，層混合行列の正準分解を紹介しましょう．

2　行と列の並べ換え

変数 $\boldsymbol{x}$ に関する連立方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ において，変数と方程式を上手く並べかえると解きやすい形にできることがあります．例として，

$$A = \begin{array}{c|ccccccc|}
 & x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 & x_7 \\ \hline
e_1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2 & 0 & 0 \\
e_2 & 0 & 0 & 2 & 1 & 0 & 5 & 0 \\
e_3 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 1 \\
e_4 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
e_5 & 3 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\
e_6 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 1 \\
e_7 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 3 & 4 \\ \hline
\end{array}$$

の場合を考えましょう．四角枠の上にある $x_1, x_2, \ldots$ は，その列に対応する変数名です．また，左にある $e_1, e_2, \ldots$ は，その行の表す方程式に名前をつけたものです．右辺のベクトル $\boldsymbol{b}$ は何であっても構いません．連立方程式を解くときには，変数を順番に消去していけばよいという一般的指針がありますが，変数の個数が多いとそれも大変そうです．

そこで，変数や方程式を並べる順番は自由に選べることに着目して，変数を $x_2, x_5, x_1, x_3, x_6, x_4, x_7$ の順に，方程式を $e_1, e_5, e_4, e_2, e_7, e_3, e_6$ の順に並べ換えてみると，係数行列は

$$\bar{A} = \begin{array}{c|cc|c|cc|cc|}
 & x_2 & x_5 & x_1 & x_3 & x_6 & x_4 & x_7 \\ \hline
e_1 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
e_5 & 1 & 1 & 3 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline
e_4 & & & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline
e_2 & & & & 2 & 5 & 1 & 0 \\
e_7 & & & & 1 & 3 & 0 & 4 \\ \hline
e_3 & & & & & & 4 & 1 \\
e_6 & & & & & & 3 & 1 \\ \hline
\end{array} \qquad (1)$$

となります．ここで，左下の空白の部分の要素はすべて 0 ですが，このような形を**ブロック三角形**（正確には上三角形）といいます．

この形にしてみると，全体の方程式を解くには次のような順番ですればよいことが分かります．最初に方程式 e_3, e_6 に着目して

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_4 \\ x_7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_3 \\ b_6 \end{bmatrix}$$

から変数 x_4, x_7 を定めることができます．その次には，

---

[*]2005 年夏学期「応用数理学」資料；数学セミナー，2004 年 6 月号, pp. 38–43, 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

方程式 e_2, e_7 を用いて

$$\begin{bmatrix} 2 & 5 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_3 \\ x_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_2 \\ b_7 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_4 \\ x_7 \end{bmatrix}$$

から x_3, x_6 が決まります．このとき，右辺には x_4, x_7 が含まれていますが，これらの値は既にわかっているので問題ありません．また，方程式 e_4 から

$$\begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_4 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_4 \\ x_7 \end{bmatrix}$$

によって x_1 が決まり，最後に，方程式 e_1, e_5 から x_2, x_5 が決まって，すべての変数が決まります．

このように，行列の行と列を並べ換えてブロック三角形にできれば，全体の方程式系が小さな方程式系の集まりに分解できることになります．上の例においては，７つの変数が順序のついた４つのブロックに分かれて

$$\{x_2, x_5\} \leftarrow \{x_1\} \leftarrow \{x_3, x_6\} \leftarrow \{x_4, x_7\}$$

という順序になっていましたが，x_1 を決める方程式の右辺には x_3, x_6 が含まれないので，ブロックを並べる順序を

$$\{x_2, x_5\} \leftarrow \{x_3, x_6\} \leftarrow \{x_1\} \leftarrow \{x_4, x_7\}$$

とすることもできます．したがって，ブロックの間の順序関係は，一列に並んだ順序ではなくて，

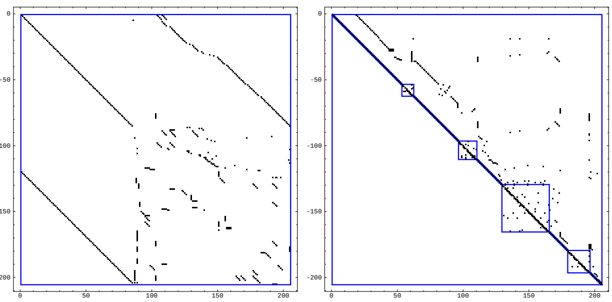
$$\begin{array}{ccccc} & & \{x_3, x_6\} & & \\ & \swarrow & & \nwarrow & \\ \{x_2, x_5\} & & & & \{x_4, x_7\} \\ & \nwarrow & & \swarrow & \\ & & \{x_1\} & & \end{array} \tag{2}$$

で表される**半順序**と考えるのが適当です．ブロック三角行列 (1) の構造が，ブロックへの分割とブロック間の半順序 (2) によって決まっていることに注意してください．

一般の行列に対しても，行と列の並べ換えによるブロック三角化を考えることができますが[1]， このとき最も細かいブロック三角分解が一意的に定まることが知られていて，**Dulmage-Mendelsohn 分解**（略して **DM 分解**）と呼ばれています．

DM 分解は行列のブロック三角化を与えるものですが，その応用上の意義として，行列によって記述される物理的・工学的システムの**階層構造**を抽出するものであるという解釈が成り立ちます．DM 分解におけるそれぞれのブロックがサブシステムに対応し，ブロック間の半順序がサブシステム間の階層構造を表現していると解釈する訳です．そうすると，DM 分解が一意的に確定するという数学的事実は，物理的にはシステムの階層構造が一意に定まることを意味していることになります．さらに都合のよいことに，DM 分解を見出す高速なアルゴリズムがあるので，DM 分解を実際のシステムの解析に利用することができます．

化学工学の例題に DM 分解を適用してみた例 (文献 [2] の p.196) を示します．行列は 205 次の正方行列で，左が与えられた行列，右がその DM 分解です．



行列が疎行列であることと DM 分解によって小さなブロックに分解していることに着目してください．

3　行列表現と分解の一意性

システムを記述する行列が与えられれば，DM 分解が一意に決まって，それからサブシステムとその間の階層構造が得られるというのが前節の図式でした．

物理世界：	システム		階層構造
	$\Downarrow$		$\Uparrow$
数学世界：	行列	$\Rightarrow$	DM 分解

この図式にはちょっと気になることがあります．一般に，システムの記述の仕方には自由度があるので，行列の形は一意的に決まらず，したがって，その DM 分解を通じて得られるシステムの階層構造には恣意性（任意性）が入り込んでしまう可能性があるということです．工学的な立場からは，数式表現の恣意性に影響されないような物理的に意味のある階層構造を抽出した

[1]行列が正則でない場合には，ブロック三角形の意味を拡張する必要があります [1], [2].

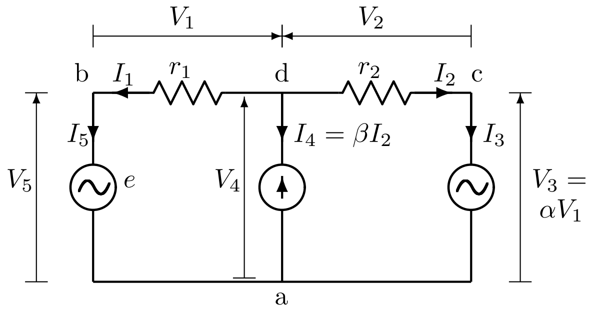


図 1: 電気回路の例

い訳です．つまり，物理的に意味のある階層構造は数式表現によらずに定まる「不変量」になっていて欲しいという訳です．[2]

本節では，簡単な電気回路を例題として，数式表現の恣意性と階層構造の不変性について具体的に考えてみましょう．電気回路のようなシステム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，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 $V_1 = r_1 I_1$, $V_2 = r_2 I_2$ 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．

[2]これは，座標系のとり方によらずに定まる性質が意味のある性質であると考える「幾何学の精神」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, b, c における電流の保存より

$$I_3 + I_4 + I_5 = 0, \quad I_1 - I_5 = 0, \quad I_2 - I_3 = 0 \tag{3}$$

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 $V_1 - V_4 + V_5 = 0$, $V_2 + V_3 - V_4 = 0$ 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 $\boldsymbol{x} = [I_1, \ldots, I_5, V_1, \ldots, V_5]^\top$ 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 次行列 $A^{(1)}$ が図 1 の電気回路を記述する行列です（空白の部分の要素はゼロです）．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．さらに行列 $A^{(1)}$ の DM 分解を求めると，10 個の変数は

$$\{I_1, I_2, I_3, I_4, I_5, V_1, V_2, V_3, V_4\} \quad \leftarrow \quad \{V_5\} \tag{4}$$

のように 2 つのブロックに分かれます．

ところで，電流と電圧の保存則の書き表し方は一意的に決まるものではありません．電流則は，点 a, b, c の代わりに点 b, c, d の 3 点を考えて

$$I_1 - I_5 = 0, \quad I_2 - I_3 = 0, \quad I_1 + I_2 + I_4 = 0 \tag{5}$$

としても同等です．電圧則は，左の正方形と大きな長方形を考えて,

$$V_1 - V_4 + V_5 = 0, \quad -V_1 + V_2 + V_3 - V_5 = 0 \tag{6}$$

としても同等です．保存則を (5)，(6) のように記述したときの方程式系は

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

となり，この係数行列 $A^{(2)}$ の DM 分解は

$$
\bar{A}^{(2)} = \begin{array}{c|c|c|cccccc|c|}
\multicolumn{1}{c}{I_3} & \multicolumn{1}{c}{I_5} & \multicolumn{1}{c}{V_4} & I_1 & I_2 & I_4 & V_1 & V_2 & \multicolumn{1}{c}{V_3} & \multicolumn{1}{c}{V_5} \\ \hline
1 & & & & -1 & & & & & \\ \hline
& 1 & & -1 & & & & & & \\ \hline
& & 1 & & & & -1 & & & -1 \\ \hline
& & & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \\
& & & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 \\
& & & r_1 & & & -1 & & & \\
& & & & r_2 & & & -1 & & \\
& & & & & & \alpha & & -1 & \\
& & & & \beta & -1 & & & & \\ \hline
& & & & & & & & & -1 \\ \hline
\end{array}
$$

のようになります．変数は 5 つのブロックに分かれて，

$$
\begin{array}{ccccc}
\{I_3\} & & & & \\
& \nwarrow & & & \\
\{I_5\} & \leftarrow & \{I_1, I_2, I_4, V_1, V_2, V_3\} & \leftarrow & \{V_5\} \\
& \swarrow & & & \\
\{V_4\} & & & &
\end{array} \tag{7}
$$

のような階層構造になっています．

二つの行列 $A^{(1)}$, $A^{(2)}$ の DM 分解が異なる階層構造 (4), (7) を与えています．一つの電気回路の分解が，それを記述する数式表現の選び方によって変わってしまうようでは，物理的に意味のあるものとは考えられません．これは困った状況です．

二つの行列 $A^{(1)}$，$A^{(2)}$ の違いは保存則の表現の違いにあり，これが異なる階層分解を生んでいます．電流保存則の二つの表現 (3)，(5) は数学的に同等であるばかりでなく，それ自体優劣はないように見えます．そもそも電流保存則はベクトル $I = (I_1, \ldots, I_5)^\top$ 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 $\{I \mid QI = 0\}$ の形に表現する仕方に応じて (3) や (5) のような異なった数式表現が生じてきます．もちろん，(3) と (5) は数学的に同等ですから，(3) の係数行列

$$
Q^{(1)} = \left[\begin{array}{ccccc} 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \end{array}\right]
$$

と (5) の係数行列

$$
Q^{(2)} = \left[\begin{array}{ccccc} 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{array}\right]
$$

との間には，正則行列 S による $Q^{(2)} = SQ^{(1)}$ という関係があります．電圧則についても同様です．

このように，電気回路の方程式のうち構造方程式（保存則）の部分については正則行列による行変換の自由度が存在します．この自由度を吸収する形で行列の分解を定義できれば，その分解を物理的に意味のある階層分解と見なしてもよいような気がします．

この気持ちを数学的に定式化してみましょう．構造方程式と構成方程式の区別を反映して，$A = \begin{pmatrix} Q \\ T \end{pmatrix}$ の形の行列を考え，構造方程式の自由度に対応する正則行列 S と，行と列の並べ換えを表す置換行列 (各行，各列に丁度ひとつの 1 があり，その他の要素はすべて 0 である行列) P_{r}, P_{c} を用いた変換

$$
\bar{A} = P_{\mathrm{r}} \begin{pmatrix} S & O \\ O & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q \\ T \end{pmatrix} P_{\mathrm{c}} \tag{8}
$$

を考えます．この変換によるブロック三角化の存在・一意性・構成法などを考察することが問題です．

実は，(8) の形の変換の下でのブロック三角形の中で最も細かい分解が一意的に定まり，効率的なアルゴリズムによって構成できることが知られています．電気回路の例では $\bar{A}^{(2)}$ が最も細かいブロック三角形です．節を改めて，理論的背景を説明しましょう．

4　層混合行列とその正準形

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．F を体，K をその部分体とします．F の元 $t_1, \ldots, t_m$ は，お互いの間に K 上の代数的従属関係[3] がないときに K 上代数的独立であると呼ばれます．

行列 A が（その行を適当に並べ換えたときに）

$$
A = \begin{pmatrix} Q \\ T \end{pmatrix} \tag{9}
$$

の形であって，Q の要素は K の元，T の非零要素全体は K 上代数的独立な F の元であるとき，行列 A を (K に関する) **層混合行列**(layered mixed matrix) (略して **LM 行列**) と呼びます．前節の電気回路を記述する行列 $A^{(1)}, A^{(2)}$ は（構成方程式に適当な超越数を乗じて代数的独立性の条件を満たすようにできるので）実質的に LM 行列と見なすことができます．

LM 行列 A に対して，二つの置換行列 P_{r}, P_{c} と K 上の正則行列 S による (8) の形の変換を許容変換と考え，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します．LM 同値類の性

[3] 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．

質が数式表現によらない不変な性質であると考えられます．

実は，許容変換 (8) 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とが知られていて，LM 行列の**組合せ論的正準形**(combinatorial canonical form) (略して **CCF**) と呼ばれています．CCF の一意性によって「サブシステム」と「階層構造」という概念が数式表現の恣意性によらない性質として定義されることになります．すなわち，CCF の対角ブロックが「サブシステム」であり，CCF の半順序が「階層構造」です．

以下，CCF の構成法の概略を述べましょう．LM 行列 A が与えられたとし，その列番号の集合を C とします．部分集合 $J \subseteq C$ に対応する行列 Q, T の部分行列を $Q[J], T[J]$ と表すことにして，$Q[J]$ の階数を $\rho(J)$, $T[J]$ の階数を $\tau(J)$, $T[J]$ の非零行数を $\gamma(J)$ とすると，A の階数は次のように与えられます．

定理 1: A を LM 行列とするとき，

$$\mathrm{rank}\, A = \max\{\rho(J) + \tau(C - J) \mid J \subseteq C\},$$
$$\mathrm{rank}\, A = \min\{\rho(J) + \gamma(J) - |J| \mid J \subseteq C\} + |C|.$$

関数 ρ, τ, γ はいわゆる**劣モジュラ関数**であり，

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

の形の不等式を満たしています．この事実と定理 1 により，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計算できることになり，LM 行列は大規模システムの構造解析の道具として使えることになります [2].

定理 1 の第 2 の等式に現われている関数 $p(J) = \rho(J) + \gamma(J) - |J|$ は許容変換 (8) の下での不変量になっています．そこで，p の最小値を与える集合の族

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

に着目してみると，p が劣モジュラ関数なので,「$I, J \in \mathcal{L} \Longrightarrow I \cup J, I \cap J \in \mathcal{L}$」が成り立ちます（証明:$2 \min p = p(I) + p(J) \geq p(I \cup J) + p(I \cap J) \geq 2 \min p$）．したがって，$\mathcal{L}$ は集合束 2^C の部分束となり，部分束 $\mathcal{L}$ から C のブロック分割が定まり（Birkhoff の表現定理）, これからブロック三角形が作れるというのが CCF 構成の道筋です．

CCF を効率的に求めるには，上に説明した構成法とは別に高速なアルゴリズムがあります．A が正則の場合の流れは次のようになります．

CCF を求める算法の大略（A が正則の場合）

1) $Q[J]$ と $T[C \setminus J]$ 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 1 の第 1 式により，このような J が存在する)．
2) $Q[J]$ の逆行列を S として $A' = \begin{pmatrix} S & O \\ O & I \end{pmatrix} A$ とおき，その DM 分解を求める．

なぜこの算法で CCF が求められるのか，あるいは，第 1 ステップの J を効率的に求めるには具体的にどうすればいいのかなど，この算法の詳細には疑問が残ります．CCF に関わる数理については，[2] の 4 章を参照してください．

なお，本稿では正則な行列に対するブロック三角化を扱いましたが，正則でない場合にも DM 分解や CCF は定義されます ([2] の 2.2 節, 4 章参照).

参考文献

[1] 室田一雄: 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, 応用数理, 1 (1991), pp. 230–248.

[2] K. Murota: *Matrices and Matroids for Systems Analysis*, Springer-Verlag, Berlin, 2000.

[3] 室田一雄: 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.