線形代数と組合せアルゴリズム

東京大学計数工学科2年　隈部 壮
(DEGwer)

§1. 行列の基礎

・「行列」とは…？　：「長方形状に数が並んだもの」

(例)
$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 4 \\ 5 & 1 & 4 \end{pmatrix}$$
← これは 2×3 行列

本講義では「正方行列」しか扱わないので、以下 $n=m$ とする。

・置換の符号 $\mathrm{sgn}\,\sigma$ 「シグマ」

permutation (順列) $\sigma(1), \sigma(2), \cdots, \sigma(n)$ に対し、

$\mathrm{sgn}\,\sigma$ を、「順列 $1, 2, \cdots, n$ から順列 $\sigma(1), \cdots, \sigma(n)$ をつくるときに
(2つの項を入れ替える操作を偶数回するときは 1
奇数回するときは -1」

と定義する。これは well-defined (証明略)。

(競プロの人は、「バブルソートの交換回数の偶奇」と考えると楽かも)

(例) 置換 $2, 5, 1, 3, 4$ の符号は、

$1,2,3,4,5 \to 3,2,1,4,5 \to 2,3,1,4,5 \to 2,4,1,3,5 \to 2,5,1,3,4$

と4回の交換でこの置換をつくれるので 1

・行列式 (determinant)

行列 $A = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}$ に対し，行列式 $\det A$ を，

$$\det A = \sum_{\sigma : \text{permutation}} \operatorname{sgn}\sigma \, A_{1\sigma(1)} A_{2\sigma(2)} \cdots A_{n\sigma(n)}$$ と定義する．

← $n!$ 通りについて足す

(補足：$\operatorname{sgn}\sigma$ の項をとると permanent と呼ばれる値になる)

(例) $\det\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} = 4 - 6 = -2$

・行列式の性質

(i) ある列の値をすべて c 倍すると行列式は c 倍になる

(例) $\det\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} = \det\begin{pmatrix} 1 & 2\cdot 1 \\ 3 & 2\cdot 2 \end{pmatrix} = 2\cdot\det\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}$

(ii) ある列を別の列に足しても行列式はかわらない

例) $\det\begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} = \det\begin{pmatrix} 1 & 3+1 \\ 2 & 4+2 \end{pmatrix} = \det\begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 6 \end{pmatrix}$

(iii) 2つの列を入れかえると，符号が反転する．

(iv) ガウス消去により，$O(n^3)$ 時間で計算できる．

((i)〜(iii) を用いる)．

(permanent に関しては，特に(ii)がなりたたないので一般に #P-complete)

((i)〜(iii) はいずれも定義式の展開から導かれる．行に関しても同様．)．

・余因子

行列 A の i 行目と j 列目をとりのぞいた行列の行列式の $(-1)^{i+j}$ 倍を A の i,j-余因子と呼ぶ．

例) $A = \begin{pmatrix} 8 & 1 & 0 \\ 8 & 9 & 3 \\ 3 & 3 & 4 \end{pmatrix}$ の 1,2-余因子は $(-1)^{1+2}\cdot\begin{pmatrix} 8 & 3 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} = -23$．

§2. LGV公式

・LGV公式

・DAG(有向無閉路グラフ)があり, そのうち

n個の頂点$a_1, \cdots, a_n$が始点,

n個の頂点$b_1, \cdots, b_n$が終点とマークされている.

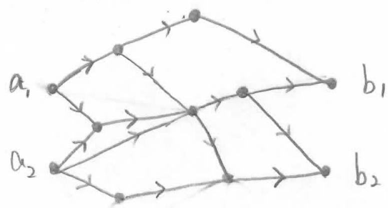
$i<j$なら, $a_i \to b_j$へのパスと$a_j \to b_i$へのパスはかならず頂点を共有するとき,

パスのn個組であり, i個目のパスの始点はa_iで, 終点はb_iであり, どの2つのパスも頂点を共有しないようなものの個数は,

X_{ij}を, $a_i \to b_j$へのパスの個数とすれば,

$$\det\begin{pmatrix} X_{11} & \cdots & X_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ X_{n1} & \cdots & X_{nn} \end{pmatrix}$$ にひとしい.

(例)



このとき,

$X_{11}=3,\ X_{12}=4,\ X_{21}=2,\ X_{22}=5,\ \det\begin{pmatrix} X_{11} & X_{21} \\ X_{12} & X_{22} \end{pmatrix}=7$で,

$a_1 \to b_1$, $a_2 \to b_2$へのパスの組で, 頂点を共有しないものの数も7であることが確認できる.

・証明

行列 $\begin{pmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nn} \end{pmatrix}$ の行列式の各項 $\mathrm{sgn}\,\sigma\, x_{1\sigma(1)} x_{2\sigma(2)} \cdots x_{n\sigma(n)}$ は,

$a_1 \to b_{\sigma(1)}, a_2 \to b_{\sigma(2)}, \cdots, a_n \to b_{\sigma(n)}$ への,(頂点を共有してもよい)
パスの組の個数の $\mathrm{sgn}\,\sigma \,(\in \{1, -1\})$ 倍である.

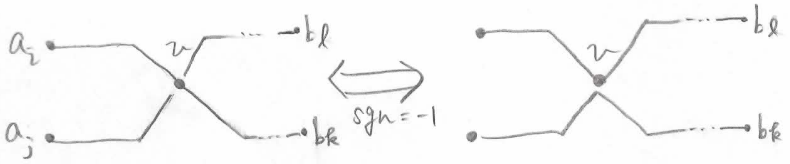
$a_1 \to b_{\sigma(1)}, \cdots, a_n \to b_{\sigma(n)}$ へのパスの組をひとつとる.
また, 始点と終点以外の頂点に, 番号をつけておく.

・このパスの組が, どの2つのパスも頂点を共有しない場合.

・これが数えたい場合の数である. グラフに関する条件より, $\sigma(1)=1, \cdots, \sigma(n)=n$ であり, 項 $x_{11}x_{22}\cdots x_{nn}$ の中でちょうど1回数えられる.

・このパスの組が, どこかの頂点を共有する場合

・2つ以上のパスに含まれる頂点のうち, 番号がいちばん小さいものをとり, v とする.



また, v を通るパスのうち, 始点のそえ字が小さいものから2つとって, その始点を a_i, a_j, 終点を b_k, b_l とする.

いま, 上のように, $a_i \to v \to b_k$, $a_j \to v \to b_l$ のパスを, (v のまわりのみいじって) $a_j \to v \to b_k$, $a_i \to v \to b_l$ のパスにおきかえたようなパスの集合を考えると, 「頂点を共有するパス対があるようなパス集合全体」に, 一対一対応がつくれる. このようなペアに対し, a_i から出るパスの終点を $\sigma(i)$ とみなしたときの置換の符号は, 2要素をいれかえただけであるので異なる. よって, 行列式を求めるとき, これらは相殺され, 0回数えられることになる.

よって, 示された.

§3 行列木定理

行列木定理

n頂点の無向グラフに対し,そのラプラシアンを,

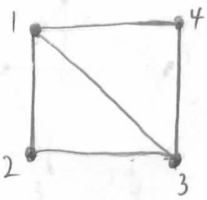
$n\times n$行列 $X=\begin{pmatrix} X_{11} & \cdots & X_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ X_{n1} & \cdots & X_{nn} \end{pmatrix}$ で,

$$\left\{\begin{array}{l} i\neq j \text{ に対し, } X_{ij} = -(\text{頂点}i\text{と頂点}j\text{を結ぶ辺の数}) \\ X_{ii} = (\text{頂点}i\text{の次数}) \end{array}\right.$$

とすると,

Xの任意の余因子は,そのグラフの全域木の個数にひとしい.

(例)



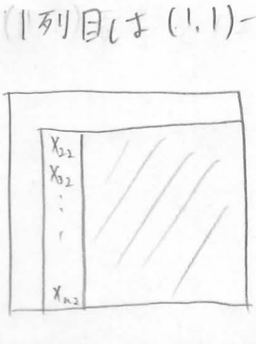
に対し,ラプラシアンは $\begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$ で,

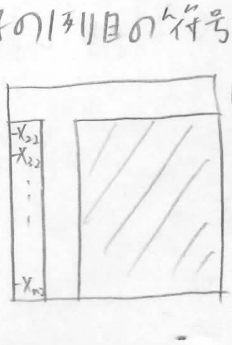
その1,1−余因子 $\det\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} = 8$ は,このグラフの

全域木の個数にひとしい.

補題:各行,各列の和がすべて0であるような行列(特にグラフのラプラシアン)の任意の余因子はひとしい.

証明:(1,1)-余因子と(1,2)-余因子がひとしいことのみ示せばよい.
(1,2)-余因子について,その1列目以外を1列目に足せば,
1列目は(1,1)-余因子の1列目の符号を反転させたものになる.よって,





($(-1)^{1+1} = -1\cdot(-1)^{1+2}$ より)
(1,1)-余因子と(1,2)-余因子はひとしい

定理の証明

帰納法による。辺数が0の場合、明らか。

いま、辺を1本ふやすことを考える。一般性を失わず、この辺 e は行列の1,2行目に対応する頂点の間を結ぶとしてよい。

このグラフの全域木は、

- e を使わないもの
- e を使うもの

の2種類に分けられる。前者は、辺 e をとりのぞいたグラフの全域木の個数にひとしい。後者は、辺 e を縮約したグラフの全域木の個数にひとしい。よって、新しいグラフの全域木の個数は、帰納法の仮定より、

(新しいグラフの点 i の次数を d_i, i-j 間の辺の本数を a_{ij} とすれば)、

$$\det\begin{pmatrix} d_2-1 & -a_{23} & \cdots & -a_{2n} \\ -a_{32} & d_3 & \cdots & -a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & -a_{n-1\,n} \\ -a_{n2} & -a_{n3} & \cdots\ -a_{n\,n-1} & d_n \end{pmatrix} + \det\begin{pmatrix} d_3 & \cdots & -a_{3n} \\ \vdots & \ddots & -a_{n-1\,n} \\ -a_{n3} & \cdots\ -a_{n\,n-1} & d_n \end{pmatrix}$$

$$= \det\begin{pmatrix} d_2 & -a_{23} & \cdots & -a_{2n} \\ -a_{32} & d_3 & \cdots & -a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & -a_{n-1\,n} \\ -a_{n2} & -a_{n3} & \cdots\ -a_{n\,n-1} & d_n \end{pmatrix}$$

にひとしく、これは新しいグラフのラプラシアンの1,1-余因子である。補題より、すべての余因子はひとしいので、帰納法が回り、示された。

§4. Tutte 行列

・完全マッチング

頂点数偶数のグラフについて、その辺部分集合であって、どの2辺も端点を共有せず、全頂点がその辺集合のいずれかの辺の端点となるとき、その辺集合を完全マッチングとよぶ。

・ n 頂点からなる無向グラフに対し、$n\times n$ 行列 $T=\begin{pmatrix} t_{11} & \cdots & t_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ t_{n1} & \cdots & t_{nn} \end{pmatrix}$ で、

$\left\{\begin{array}{ll} (i,j)\text{ 辺があるとき}, & t_{ij}=x_{ij},\ t_{ji}=-x_{ij} \\ \text{ないとき}, & t_{ij}=t_{ji}=0 \end{array}\right.$ としたものを、

そのグラフの Tutte 行列 とよぶ。

定理

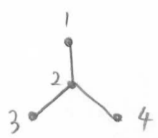
Tutte 行列の行列式が(多項式として)0でない

$\Longleftrightarrow$ そのグラフに完全マッチングが存在

(例)

に対し、Tutte 行列は $\begin{pmatrix} 0 & x_{12} & 0 & 0 \\ -x_{12} & 0 & x_{23} & 0 \\ 0 & -x_{23} & 0 & x_{34} \\ 0 & 0 & -x_{34} & 0 \end{pmatrix}$,

その行列式は $x_{12}^2 x_{34}^2 \neq 0$.



に対し、Tutte 行列は $\begin{pmatrix} 0 & x_{12} & 0 & 0 \\ -x_{12} & 0 & x_{23} & x_{24} \\ 0 & -x_{23} & 0 & 0 \\ 0 & -x_{24} & 0 & 0 \end{pmatrix}$, その行列式は0.

証明.

行列式の置換 σ に対応する項について考える。

各 i に対し、$i\to\sigma(i)$ へと辺をはったグラフを考える。

・このグラフが、奇数長閉路の連結成分をもつとき

奇数長閉路のうち、添え字最小の頂点を含むものをとり、その閉路のみ逆向きにたどってえられるグラフに対応する置換を考えると、そのふたつの置換に対応する行列式での項の値は、(置換が偶置換、変数につく符号が奇数回入れ替わるので)足して0になる。これは一対一対応なので、このような項は行列式の値に影響しない

このグラフが，偶数長閉路の連結成分しかもたないとき

もとのグラフが完全マッチングをもたないとき，この項は
(すべての閉路から1辺おきにとると完全マッチングとなるため)
つねに0となる．よって，(⇒)は示された．

(⇐)だが，完全マッチング$(a_1, b_1), \cdots, (a_{\frac{n}{2}}, b_{\frac{n}{2}})$に対し，
置換$\sigma(a_i)=b_i$, $\sigma(b_i)=a_i$に対応する項は，
$(-x_{a_1b_1}^2)(-x_{a_2b_2}^2)\cdots(-x_{a_{\frac{n}{2}}b_{\frac{n}{2}}}^2)$であり，
他のどの項ともうちけしあわない．よって示された．

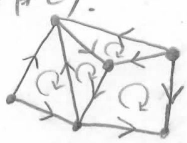
一般に，変数を係数とした行列の行列式の計算は
むずかしいが，各x_{ij}にランダムな数を代入した
行列の行列式を求めることで，十分高確率で
完全マッチングの存在判定ができる．
(ただし，普通に行列式を求めると$O(n^3)$時間かかり，
これはEdmondsのアルゴリズムと同じ計算量で，
さらに現状最速の決定性アルゴリズム$O(m\sqrt{n})$よりおそい)．
(この行列のrankとよばれる値をもとめることで，
最大マッチングのサイズも高確率でわかる)．

§5. 平面的グラフの完全マッチングの数え上げ

・<u>FKTアルゴリズム</u>

・平面的グラフに対し，行列式がその完全マッチングの個数の2乗となるような行列を構成できる．

・まず，グラフの辺に対して，適切に向きをつける．
このとき，グラフの任意の面について，時計回りの方向の辺が奇数本となるように向きづけていく．
(このような向きづけは，グラフに「面を内側からふやしていく」ことで，具体的に構成可能)．

例 

このとき，偶数長閉路であって，その閉路の辺を1辺おきに使うような完全マッチングが存在するようなものに対して，
その閉路に時計回りの辺が奇数本存在することが，
Eulerの多面体定理と，その閉路内部に
偶数個の点が存在すること(上の条件より)から示せる．

$$\left(\begin{array}{l}\text{その閉路の内部および周上において，}\\ \text{辺数}+1 \equiv \text{面数} \equiv \text{各面に対する時計回りの辺数の和} \pmod 2 \text{ と，}\\ \text{閉路上の時計回りの辺数} \equiv \text{辺数} - (\uparrow\text{の最右辺}) \pmod 2 \text{ より．}\end{array}\right)$$

このような向きづけが得られたら，行列 $T = \begin{pmatrix} t_{11} & \cdots & t_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ t_{n1} & \cdots & t_{nn} \end{pmatrix}$ を，

$$\begin{cases} t_{ij} = 1 & (i \to j \text{ 辺があるとき}) \\ t_{ij} = -1 & (j \to i \text{ 辺があるとき}) \\ t_{ij} = 0 & (\text{どちらもないとき}) \end{cases}$$ とする．

(Tutte行列の t_{ij} に 1 または -1 を適切に代入したものだと思えばよい)．

Tの行列式が，グラフの完全マッチングの個数の2乗となっている．

証明

§4と同様に，$i \to \sigma(i)$ に辺をはったグラフを考える．

・このグラフが奇数長閉路の連結成分を含む場合

§4と同様の議論より，この項は行列式に寄与しない．

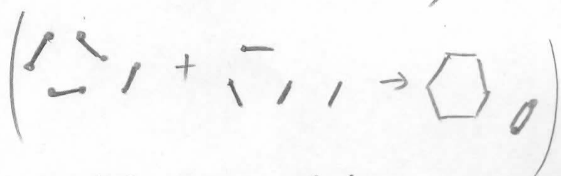
・このグラフの全連結成分が偶数長閉路な場合

このグラフがもとのグラフの部分グラフであるとする．（そうでないとき，行列式に寄与しない）

また，長さ2の閉路が a 個，長さ4以上の閉路が b 個あるとする．

完全マッチング2つの辺をすべて集めると，（二重辺は辺2本として扱って）

長さ偶数の閉路がいくつかできるが，



完全マッチング2つの順序対であって，その辺をあつめてできたグラフが，置換 σ から定まるグラフの辺の向きを無視したものとひとしいようなものは，2^b 個ある．（ と のどちらを選ぶかの自由度が b）

また，置換 σ から定まるグラフの辺の向きを無視したものをひとつ固定すれば，そのグラフを得るような置換も 2^b 個ある．（閉路の向きの自由度が b）

あとは，これらの置換に対応する項がすべて1であることを示せばよい．これは，

・置換の符号が $(-1)^{a+b}$

・もとのグラフの偶数長閉路であって，その辺を1本おきにとったようなものを含むような完全マッチングに対し，時計回りの辺は奇数本であるという条件より，各閉路に対してその有向辺に対応する t_{ij} たちの積は -1，よって

$t_{1\sigma(1)} t_{2\sigma(2)} \cdots t_{n\sigma(n)} = (-1)^{a+b}$ より，

$\mathrm{sgn}\,\sigma \; t_{1\sigma(1)} \cdots t_{n\sigma(n)} = 1$ となり，示された．