

## レッスン 15 行列とグラフ

このレッスンでは行列のグラフを定義し、簡単な応用例として、「行列のグラフの強連結性（各頂点から他のすべての頂点に至る道が存在する）⇔行列の既約性（順列行列相似変換による、ブロック三角行列化が不可能）」およびこの事実の2次元境界値問題の差分法による解法への応用をのべる。グラフ理論入門のつもりで読んで頂きたい。

### 15.1 行列のグラフ

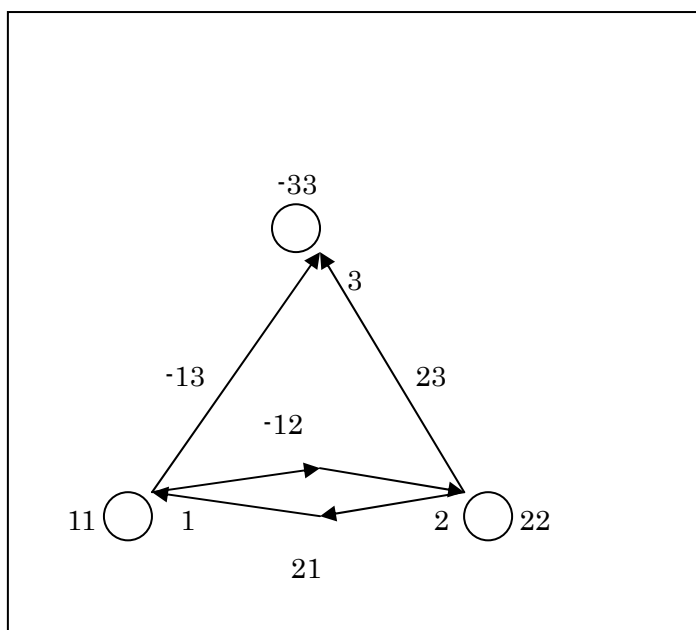
与えられた  $n$  次正方行列  $\mathbf{A} = [a_{ij}]$  の グラフ graph を定義する。平面上に  $n$  個の点

$1, 2, \dots, n$  (頂点 vertex という) を用意し、 $a_{ij} \neq 0$  なら頂点  $i$  から頂点  $j$  に向かう 有向辺 directed

edge を引き（向きは矢印で示す）、値  $a_{ij}$  を書き添える。 $a_{ij} = 0$  なら何もしない。これをすべて

の  $i, j$  に対して実行してできる 有向グラフ directed graph を  $\mathbf{A}$  のグラフといい、記号  $G(\mathbf{A})$  で表す。このようなグラフと行列が 1 対 1 対応することは明らかである。

例 1  $\mathbf{A} = [a_{ij}] = \begin{bmatrix} 11 & -12 & -13 \\ 21 & 22 & 23 \\ 0 & 0 & -33 \end{bmatrix}$  のグラフは次図で与えられる：



$a_{31} = a_{32} = 0$  であるから、頂点 3 から頂点 1 あるいは 2 へ向かう有向辺は存在しない。頂点からそれ自身へ向かう有向辺は円で示してある。

## 15.2 強連結成分

次に、強連結成分の概念を定義しよう。これは同値類として定義するのがもっともわかりやすい。まず、 $n$  次行列  $\mathbf{A} = [a_{ij}]$  のグラフ  $G(\mathbf{A})$  における頂点集合  $\{1, 2, \dots, n\}$  上に次の同値関係 “ $\sim$ ” を定義する： $1 \sim 1, 2 \sim 2, \dots, n \sim n$  と定義し、 $i \neq j$  なら、 $i \sim j$  とは頂点  $i$  から頂点  $j$  への道 path も、頂点  $j$  から頂点  $i$  への道も、存在することをいう。ただし、ここで「頂点  $i$  から頂点  $j$  への道が存在する」とは「有向辺  $i \rightarrow j$  が存在するか、

$i \rightarrow t_1, t_1 \rightarrow t_2, t_2 \rightarrow \dots, \rightarrow t_k, t_k \rightarrow j$  のような(尻取り式の)有向辺の列が存在することをいう。

関係 “ $\sim$ ” は、回帰性、対称性、推移性、を満たすから、たしかに同値関係を表す。同値類に属する、異なる 2 頂点間には常に双方向の道が存在し、また任意の同値類とそれに属さない頂点との間には双方向の道は存在しないことは明らかである。一つ一つの同値類を強連結成分 strongly connected component という。強連結成分が 1 個しかない場合、グラフ  $G(\mathbf{A})$  自体が強連結であるという。与えられた有向グラフの強連結成分は巧妙な「Depth-First Search Algorithm」(R. E. Tarjan, SIAM Journal on Computing 1, 146-160, 1972, とくに p.157) によって検出できる。

例 2 例 1 で考えたグラフの強連結成分は  $\{1, 2\}, \{3\}$  の 2 個である。このグラフは強連結ではない。■

例 3 一般に、ブロック三角行列

$$\mathbf{A} = [a_{ij}] = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix} \quad \text{または} \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix} \quad (\mathbf{A}_{11} : k \times k, \mathbf{A}_{22} : l \times l)$$

のグラフは強連結ではない。実際、前者の場合、 $a_{ij} = 0 (i = k+1, \dots, k+l, j = 1, \dots, k)$  なので、頂点集合  $\{k+1, \dots, n\}$  に属する頂点から、頂点集合  $\{1, \dots, k\}$  に属するどの頂点に向かう有向辺も存在しない。■

## 15.3 頂点番号の付け替えは順列行列による相似変換に対応する

$n$  次行列  $\mathbf{A} = [a_{ij}]$  のグラフにおいて、頂点番号を振りなおせば、別の行列  $\mathbf{B} = [b_{kl}]$  に対応するグラフが得られる。しかし両者は、適当な順列行列  $\mathbf{P}$  (単位行列の行と列を並べ替えて得られる行列、 $\mathbf{P}^T = \mathbf{P}^{-1}$  を満たす) を介して相似変換

$$(1) \quad \mathbf{A} = \mathbf{P}^T \mathbf{B} \mathbf{P} \quad \text{あるいは} \quad \mathbf{P} \mathbf{A} \mathbf{P}^T = \mathbf{B}$$

の形の関係で結ばれることを示そう。実際、

$$(2) \quad \mathbf{P} = [\mathbf{e}_{j_1}, \mathbf{e}_{j_2}, \dots, \mathbf{e}_{j_n}] \quad (j_1, \dots, j_n \text{ は } 1, \dots, n \text{ の順列、 } \mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n \text{ は単位行列の第 } 1, \dots, n \text{ 列})$$

とすれば、 $\mathbf{A}, \mathbf{B}$  の成分間には関係式

$$(3) \quad a_{pq} = b_{j_p, j_q} \quad (p, q = 1, \dots, n)$$

が成立するから、 $\mathbf{B}$  のグラフは、 $\mathbf{A}$  のグラフの頂点番号を  $1 \rightarrow j_1, \dots, n \rightarrow j_n$  と変更して得られるグラフに他ならない。

#### 15.4 強連結性と既約性は同値である

頂点番号の付け替えはグラフの強連結性とは無関係であるから、与えられた行列  $\mathbf{A}$  のグラフに関して

「 $G(\mathbf{A})$  が強連結  $\leftrightarrow$  任意かつ特定の順列行列  $\mathbf{P}$  に対して  $G(\mathbf{PAP}^T)$  が強連結」

「 $G(\mathbf{A})$  が強連結でない  $\leftrightarrow$  任意かつ特定の順列行列  $\mathbf{P}$  に対して  $G(\mathbf{PAP}^T)$  は強連結でない」

が成り立つことは明らかである。さらに、次の事実が成立する：

「 $G(\mathbf{A})$  が強連結  $\leftrightarrow$  どんな順列行列  $\mathbf{P}$  に対しても、 $\mathbf{PAP}^T$  が決してブロック三角行列形にはならない (後者が真なら  $\mathbf{A}$  は既約 irreducible であるという)」

証明 (→) 特定の順列行列  $\mathbf{P}$  に対して  $\mathbf{PAP}^T$  がブロック上 (または下) 三角行列となれば、 $G(\mathbf{PAP}^T)$  は強連結ではなく (前節例 3)、従って  $G(\mathbf{A})$  も強連結ではない。

(←)  $G(\mathbf{A})$  が強連結でないとする。適当な順列行列  $\mathbf{P}$  に対して  $\mathbf{PAP}^T$  がブロック三角行列になることを示せばよい。そこで、 $G(\mathbf{A})$  の強連結成分を一つとり、これに属する頂点を改めて  $\{1, \dots, k\}$  と名づけ、その他の頂点を  $\{k+1, \dots, n\}$  と名づけると、 $G(\mathbf{A})$  は強連結でないから、

どちらの集合も空集合ではない。この新グラフに対応する行列は明らかに  $\begin{bmatrix} \mathbf{B}_1 & \mathbf{B}_2 \\ \mathbf{0} & \mathbf{B}_3 \end{bmatrix}$  型か

$\begin{bmatrix} \mathbf{B}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{B}_2 & \mathbf{B}_3 \end{bmatrix}$  型かのブロック三角行列でなければならない ( $\mathbf{B}_1 : k \times k$ ,  $\mathbf{B}_3 : (n-k) \times (n-k)$ )。ど

ちらの行列も、 $G(\mathbf{A})$  のグラフから頂点番号の付け替えによって得られたグラフに対応する行列を表すから、適当な順列行列  $\mathbf{P}$  に対して  $\mathbf{PAP}^T$  と書けるはずである。■

#### 15.5 グラフが強連結な優対角行列は可逆である

$n$  次行列  $\mathbf{A} = [a_{ij}]$  ( $n > 1$ ) が優対角である diagonally dominant とは、各行の非対角成

分の絶対値の総和がその行の対角成分の絶対値を超えず、少なくとも一つの行については、厳密に小さいこと、すなわち：

$$(1) \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| \leq |a_{ii}| \quad (i=1, \dots, n)$$

が成立し、少なくとも一つの  $i$  の値に対して、上式中の “ $\leq$  “記号を”  $<$  “で置き換えられること、をいう。次の事実が成立する：

「グラフが強連結な優対角行列は可逆である」、すなわち、「既約な優対角行列は可逆である」 ( $\because G(\mathbf{A})$  の強連結性  $\Leftrightarrow \mathbf{A}$  の既約性)

証明 可逆でない優対角行列のグラフは強連結ではないことを示せばよい。  $\mathbf{A}$  を可逆でない優対角行列とする。すると  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}$  を満たす  $\mathbf{x} = [x_i] \neq \mathbf{0}$  ( $\max |x_i| = 1$ ) が存在する。まず

$|x_1| = \dots = |x_n| = 1$  の場合は起りえないことを示す。実際、  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}$  を展開し、(\*)

$$-a_{ii}x_i = \sum_{j, j \neq i} a_{ij}x_j \quad (i=1, \dots, n) \text{ と書き、両辺の絶対値をとれば、} |a_{ii}| \leq \sum_{j, j \neq i} |a_{ij}| \quad (i=1, \dots, n) \text{ と}$$

なる。これは  $\mathbf{A}$  の優対角性に矛盾する。ゆえに  $|x_1|, \dots, |x_n|$  の中に 1 に等しいものと厳密に 1 以下

のものが混在していることになる。そこで、集合  $S = \{i : |x_i| = 1\}$ 、 $T = \{j : |x_j| < 1\}$  とすれば、

$S \neq \phi$ 、 $T \neq \phi$ 、 $S \cap T = \phi$ 、 $S \cup T = \{1, \dots, n\}$  となる。  $a_{ij} = 0$  ( $i \in S$ 、 $j \in T$ ) を示す。

実際、 $i \in S$  なら(\*)より、 $|a_{ii}| \cdot 1 \leq \sum_{j \in S} |a_{ij}| \cdot 1 + \sum_{j \in T} |a_{ij}| |x_j|$  が成り立つ。ここで右辺第 2 項の和を

評価すると、各項  $|a_{ij}| |x_j|$  の中に  $a_{ij} \neq 0$  であるような項が一つでもあれば、 $|a_{ij}| |x_j| < |a_{ij}|$  とな

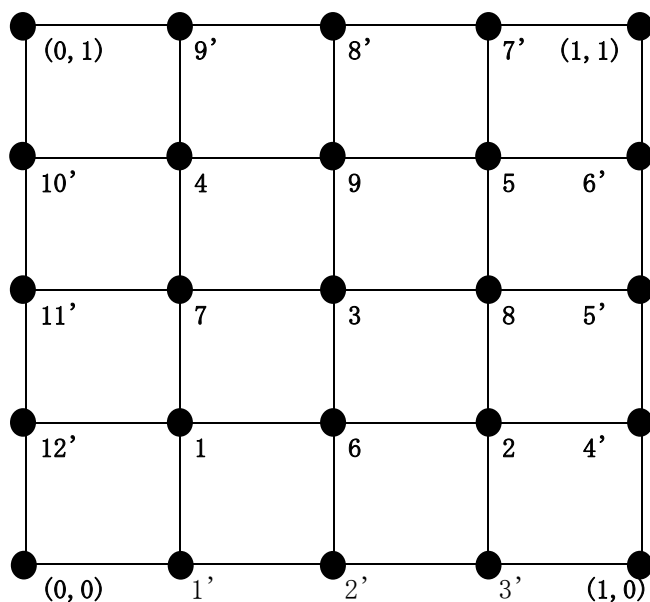
るから ( $\because j \in T$  ゆえ  $|x_j| < 1$ )、 $|a_{ii}| < \sum_{j, j \neq i} |a_{ij}|$  ( $i \in S$ ) となってしまう、 $\mathbf{A}$  の優対角性に矛盾

してしまう。ゆえに  $i \in S$ 、 $j \in T$  なら、かならず  $a_{ij} = 0$  でなければならない。これは  $S$  に

属する各頂点から  $T$  に属するどんな頂点にも向かう有向辺が存在しないことを意味する。ゆえに、 $G(\mathbf{A})$  は強連結ではない。 ■

### 15.6 行列方程式への応用

均質な正方形の板 (各辺の長さ=1) の 4 辺における温度を与えて内部の温度を定める (定常) 熱伝導問題を考える。下図は問題の正方形領域を示す。頂点の一つを原点に取り、直交座標系を辺に沿って設定する。各辺を 4 等分し、格子点 mesh point, grid point 1, 2, ..., 9 (内点) と 1', 2', ..., 12' (境界点) を導入する。境界点における温度  $T_{1'}, \dots, T_{12'}$  は既知、内点における温度  $T_1, \dots, T_9$  は未知である。



定常状態の熱伝導式  $\partial^2 T / \partial x^2 + \partial^2 T / \partial y^2 = 0$  (ラプラスの方程式) をよく知られた 5 点差分法によって、近似すると、各内点  $i (i=1, \dots, 9)$  に対応して

$$(1) \quad 4T_i - (T_{left} + T_{right} + T_{upper} + T_{lower}) = 0$$

が近似的に成り立つ。ここに、 $T_{left}, \dots$  は問題の内点の左側、 $\dots$  に隣接する内点または境界点

における温度を表す。この式を 9 個の内点について順に書き下すと、次の行列方程式  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$  が得られる：

$$(2) \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} & & & -1 & -1 & 0 & 0 \\ & & & -1 & 0 & -1 & 0 \\ & & 4\mathbf{I}_5 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ & & & 0 & -1 & 0 & -1 \\ & & & 0 & 0 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & & \\ -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & & \\ 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & & 4\mathbf{I}_4 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & & \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ T_9 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} T_{1'} + T_{12'} \\ T_{3'} + T_{4'} \\ 0 \\ T_{9'} + T_{10'} \\ T_{6'} + T_{7'} \\ T_{2'} \\ T_{11'} \\ T_{5'} \\ T_{8'} \end{bmatrix}$$

であり、 $\mathbf{I}_5, \mathbf{I}_4$  は 5 次、4 次単位行列を表す。

係数行列  $\mathbf{A}$  の各行の対角成分は 4、非対角成分の絶対値の総和は 2、3、4 のいずれかであるから、 $\mathbf{A}$  は優対角行列を表す。

また、 $\mathbf{A}$  のグラフを考えると、各内点から上下左右の内点に向かう有向辺が描かれる。ゆ

えに、 $A$  のグラフは上図において内点間の辺を両方向に結ぶ有向辺で置き換えて得られる。このグラフは一見してわかるように、強連結グラフを表す。

ゆえに、前節の結果により、 $A^{-1}$  が存在する。いいかえると、与えられた熱伝導の問題はどんな境界温度分布が与えられても、一意的な近似解が存在することになる。この結論は領域の各辺を 5 等分、6 等分、・・・、しても成り立つことは明らかであろう。一般に格子点間の間隔 mesh size をより細かくすれば、よりよい近似解の得られることが知られている。優対角性はラプラス演算子の差分近似から、グラフの強連結性は考えている正方形領域の連結性（領域が“つながっている”こと）から由来することに注意する。

最後にひとこと：

このレッスンのハイライトは「優対角性+グラフの強連結性→可逆性」である。「優対角性」の検証は簡単であり、「強連結性」は有向グラフの強連結成分をすべて検出する、Tarjan のアルゴリズム (15.2 節で言及) によって解決する。簡潔にして強力、再帰アルゴリズム recursive algorithm の威力をこのアルゴリズムから実感して頂きたい。