

グラフ論的手法による大規模連立方程式 の構造的可解性判定とブロック三角化†

伊 理 正 夫^{††} 恒 川 純 吉^{†††} 室 田 一 雄^{††}

大規模システムの設計・解析, 特にその構造的な整合性の判定と部分システムへの分解にグラフ論的な考え方が有用である。本論文では, まず非線形連立方程式の構造をグラフに表現する方法を述べ, 連立方程式の可解性が, ある一般的な仮定の下で, その表現グラフの極大点と極小点の一部を結ぶMenger型完全リンクの存在と同値であることを示す。さらに, 連立方程式がこの意味で可解な場合には, 表現グラフ上でMenger型のリンクによって対応づけられている極小点から極大点へ戻り枝を付け加えた上で, そのグラフを強連結成分に分解することによって, 連立方程式がブロック三角化されることを示す。最後に, 表現グラフに基づいて, 本質的な未知数の数を減らす方法を述べる。

1. はじめに

大規模システムの設計・解析, 特にその構造的な整合性の判定と部分システムへの分解にグラフ論的な考え方が有用であることはすでに指摘され, 実際, その手法はわが国で開発された化学プロセス用システム解析プログラム JUSE GIFS, DPS などに取り込まれて成果を挙げていることが報告されている^{1), 2)}。

グラフ論的な手法を用いて, 大規模な疎行列を行と列の置換によってブロック三角化する方法が, 逆行列の効率的な計算という観点から提案されている^{3), 4)}。また, 文献5)には, 大規模な線形計画問題の単体法による解法に関連して, 文献4)におけると同じ手法が示されている。しかし, 文献3)の方法は行と列に対して同一の置換しか許されず, また, 行と列に独立に置換を施すことを許す場合についても, 文献4)以外のものでは分解の一意性等の特徴づけが不完全であった。また, 文献4)の理論では, 基礎となるグラフは2部構造をもつものに限られていた。一般の非線形連立方程式の分解についても, 方程式と変数の間の接続行列のブロック三角化という形で, 文献6), 7) で扱われてい

る。しかし, このような方法が方程式の可解性についてどのような情報を与えるかを数学的に厳密に述べたものはないようである。

本論文では, 大規模システムを記述する連立方程式の構造を直接グラフに表現する。そして, 非線形連立方程式の可解性が, ある一般的な仮定の下で, その方程式の表現グラフ上の極大点 (=入る枝のない点) と極小点 (=出る枝のない点) の一部とを結ぶMenger型の完全リンクの存在と同値であることを示す。さらに, 連立方程式がこの意味で可解な場合には, 表現グラフ上でMenger型のリンクによって対応づけられている極小点から極大点への戻り枝を付け加えたグラフを強連結成分に分解することによって, 連立方程式が半順序のついたいくつかの部分連立方程式に分解される, すなわち, もとの連立方程式がブロック三角化されることを示す。最後に, 連立方程式を数値的に効率よく解くために, 表現グラフの構造に基づいて, 本質的な未知数の数を減らす方法を与える。

2. 連立方程式のグラフ表現と構造的可解性の判定法

2.1 問題の定式化——連立方程式の構造的可解性

$x_j (j=1, \dots, N)$, $u_k (k=1, \dots, K)$ を未知数とし, $y_i (i=1, \dots, M)$ を独立なパラメータとする次の形の非線形連立方程式

$$\begin{cases} y_i = f_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}) & (i=1, \dots, M) \\ u_k = g_k(\mathbf{x}, \mathbf{u}) & (k=1, \dots, K) \end{cases} \quad (2.1)$$

を考える。ここで, 関数 $f_i (i=1, \dots, M)$, $g_k (k=1, \dots, K)$ の値はその引数の値から容易に計算できるものと

† Graph-Theoretic Approach to Large-Scale Systems of Equations — Structural Solvability and Block-Triangularization — by MASAO IRI (Department of Mathematical Engineering and Instrumentation Physics, Faculty of Engineering, University of Tokyo), JUNKICHI TSUNEKAWA (Institute of the Union of Japanese Scientists and Engineers) and KAZUO MUROTA (Department of Mathematical Engineering and Instrumentation Physics, Faculty of Engineering, University of Tokyo).

†† 東京大学工学部計数工学科

††† (株)日本科学技術研究所

する。この形を ($M=0$ あるいは $K=0$ の場合も含めて) 標準形と呼ぶ*。 $y_i (i=1, \dots, M)$ の値を任意に指定するとき、この連立方程式が一意解をもつかどうかを判定することが我々の課題であるとする。もちろん、数値的な意味での一意可解性は、 f_i, g_k の具体的な関数形に依存するのであるが、ここで問題とするのは、以下において定義する意味で“一般的”な場合に、この連立方程式が一意解をもつ構造を有しているかどうかである。この問題は、以下に示すように、個々の方程式の関数やパラメタの値の指定の仕方には無関係に、どの方程式にどの変数が実質的に関与しているかだけに基づいて論じることができる。

連立方程式 (2.1) が一意解をもつためには一般に未知数の数と方程式の数は等しくなければならないので、以下においては $M=N$ とする。さらに方程式の関数形に関して次の仮定をおく。

“一般性”の仮定：偏導関数

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j}, \frac{\partial f_i}{\partial u_l}, \frac{\partial g_k}{\partial x_j}, \frac{\partial g_k}{\partial u_l} \quad \begin{matrix} (i=1, \dots, M) \\ (j=1, \dots, N) \\ (k, l=1, \dots, K) \end{matrix}$$

のうち恒等的に 0 でないものは、有理数体上で代数的に独立である**。■

連立方程式 (2.1) において、

$$u_k = g_k(x, u) \quad (k=1, \dots, K) \quad (2.2)$$

が

$$u_k = u_k(x) \quad (k=1, \dots, K) \quad (2.3)$$

の形に解けて、(2.1) を $x_j (j=1, \dots, N)$ に関する連立方程式

$$y_i = f_i(x, u(x)) \quad (i=1, \dots, M) \quad (2.4)$$

となすことができ、かつ、任意の $y_i (i=1, \dots, M)$ に対して、(2.4) が $x_j (j=1, \dots, N)$ について一意的に解けるならば、 $u_k (k=1, \dots, K)$ も一意に定まる。

いま、 x_j, y_i, u_k の微分間の関係式

$$dy_i = \sum_j \frac{\partial f_i}{\partial x_j} dx_j + \sum_l \frac{\partial f_i}{\partial u_l} du_l \quad (i=1, \dots, M)$$

* システムの特性を記述する方程式系を状態変数間の要素的な関数関係の集まりとして表現し、ごく一部の変数 x の値を変化させて、目的とする少数の変数 y が所望の値をもつようにするというような問題を扱うときには、この標準形が最も自然でかつ便利である¹⁾¹⁾。

** この仮定は、以下の議論からも明らかのように、必要以上に厳しいものであるが、以下の議論を簡単にするためここではこの仮定しておく。(この仮定を少し緩めることは数学的には容易な仕事である。) また、この仮定は、計算機上に具体的に与えられた有限桁の数値データに対しては、厳密に数学的な意味で成立する筈がないが、偏導関数が定数でない場合には、それぞれの関数一つの要素とみなして代数的独立性を考える。連立方程式が、ある物理的な系を記述している場合には f_i や g_k は誤差を含んだ素子特性を表現しているので、上記の仮定は多くの場合に妥当であり、電気回路網の解析や構造物の剛性の解析の際にも用いられている⁹⁾¹⁰⁾。

$$du_k = \sum_j \frac{\partial g_k}{\partial x_j} dx_j + \sum_l \frac{\partial g_k}{\partial u_l} du_l \quad (k=1, \dots, K)$$

を

$$J(f, x) = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right), \quad J(f, u) = \left(\frac{\partial f_i}{\partial u_l} \right)$$

$$J(g, x) = \left(\frac{\partial g_k}{\partial x_j} \right), \quad J(g, u) = \left(\frac{\partial g_k}{\partial u_l} \right)$$

とにおいてベクトル記法を用い

$$dy = J(f, x)dx + J(f, u)du$$

$$du = J(g, x)dx + J(g, u)du$$

と表わしておく、 $[I - J(g, u)]du = J(g, x)dx$ で、 $I - J(g, u)$ は“一般性”の仮定の下で正則であるから、陰関数定理によって、少なくとも局所的には、(2.2) が (2.3) の形に解かれる。そこで、 du を消去すると $dy = \{J(f, x) - J(f, u)(J(g, u) - I)^{-1}J(g, x)\}dx$ となる。すなわち、このとき、(2.4) のヤコビ行列 \tilde{J} は

$$\tilde{J} = J(f, x) - J(f, u)(J(g, u) - I)^{-1}J(g, x) \quad (2.5)$$

で与えられる。ここで、 $\det \tilde{J} \neq 0$ ならば、陰関数定理によって、少なくとも局所的には、任意の y_i に対して $x_j (j=1, \dots, N)$ が一意的に定まる。したがって、“一般性”の仮定のもとで $\det \tilde{J} \neq 0$ であるときに、連立方程式 (2.1) は構造的に可解であると呼ぶことにする。

行列代数の公式

$$\det \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \det D \cdot \det (A - BD^{-1}C)$$

(ただし、 A, D は正方行列で $\det D \neq 0$)

によれば、 $\det (J(g, u) - I) \neq 0$ の下で、(2.5) により

$$\det \tilde{J} = \det J / \det (J(g, u) - I), \quad J \equiv \begin{bmatrix} J(f, x) & J(f, u) \\ J(g, x) & J(g, u) - I \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

と書ける。“一般性”の仮定の下では $\det (J(g, u) - I) \neq 0$ であるので次の定理が成り立つ。

定理 2.1 標準形の連立方程式が構造的に可解であるための必要十分条件は $\det J \neq 0$ である。ただし、 J は (2.6) で定義される。■

2.2 連立方程式のグラフ表現

標準形の連立方程式の構造は、未知数およびパラメタを点に対応させ、関数関係の存在を枝に対応させることによって、グラフに表現される。すなわち、 $X \equiv \{x_1, \dots, x_N\}$, $U \equiv \{u_1, \dots, u_K\}$, $Y \equiv \{y_1, \dots, y_M\}$ の合併 $X \cup U \cup Y$ を点の集合とし、

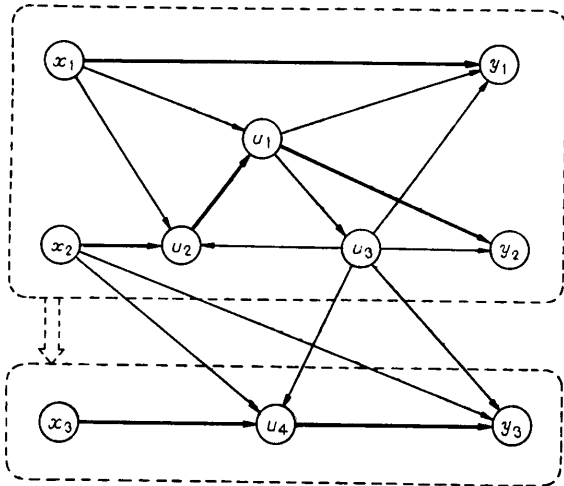


図 1 例題 (*) の表現グラフ G

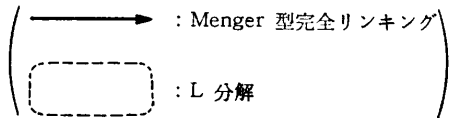
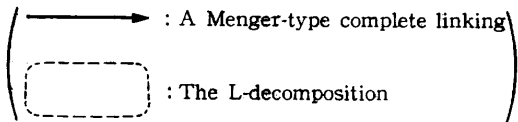


Fig. 1 Representation graph G of Example (*).



$$y_i = f_i(x, u)$$

の右辺に実質的に現われる変数 x_j, u_i から y_i に枝をひき、同様に

$$u_k = g_k(x, u)$$

の右辺に実質的に現われる変数 x_j, u_i から u_k に枝をひくことによって作られるグラフを考える。このグラフは、変数間の因果関係、あるいは情報の流れを表わしていると考えられる。これを連立方程式の表現グラフという。

例として、連立方程式

$$\begin{cases} y_1 = f_1(x_1, u_1, u_3) \\ y_2 = f_2(u_1, u_3) \\ y_3 = f_3(x_2, u_3, u_4) \\ u_1 = g_1(x_1, u_2) \\ u_2 = g_2(x_1, x_2, u_3) \\ u_3 = g_3(u_1) \\ u_4 = g_4(x_2, x_3, u_3) \end{cases} \quad (*)$$

を考えよう。その表現グラフ G は図 1 のようになる。

標準形の連立方程式の表現グラフにおいて次のことが成り立つ。

i) 点 x_j に入る枝はない、すなわち X の点は極大

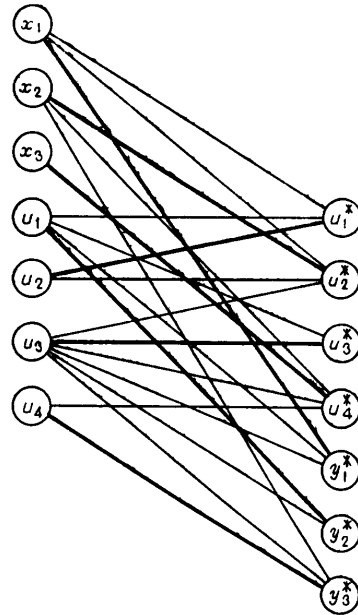
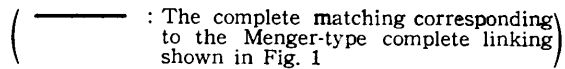


図 2 例題 (*) の表現グラフ G の随伴 2 部グラフ \tilde{G}



Fig. 2 Associated bipartite graph \tilde{G} of the representation graph G of Example (*).



点であり、その逆も成り立つ。

ii) 点 y_i から出る枝はない、すなわち Y の点は極小点である。(U の中に極小点がある場合もある。)

表現グラフ上には、変数間の関数関係の存在のみが表現され、具体的な関数形は表わされていないことに注意すべきである。

表現グラフ G (その点集合は $X \cup U \cup Y$) の随伴 2 部グラフ \tilde{G} を次のように定義する。 \tilde{G} の左端集合を $V = X \cup U$, 右端点集合を $W^* = Y^* \cup U^*$ ($Y^* = \{y_1^*, \dots, y_M^*\}, U^* = \{u_1^*, \dots, u_K^*\}$) とし、 \tilde{G} の枝 (v, w^*) ($v \in V, w^* \in W^*$) は、G に枝 (v, w) ($v, w \in X \cup U \cup Y$) が存在するか、あるいは $v = w \in U$ のとき、そしてそのときに限り存在するものとする。(x_j に入る枝、 y_i から出る枝は G 上にないことに注意。) ここで定義した随伴 2 部グラフは、一般のグラフに対する随伴 2 部グラフ¹¹⁾をここでの扱いに適するよう変更したものである。図 1 の表現グラフ G の随伴 2 部グラフ \tilde{G} を図 2 に示す。

2.3 構造的可解性の判定

以下において、連立方程式の構造的可解性の条件 (定理 2.1) が表現グラフ G の随伴 2 部グラフ \tilde{G} 上に

完全マッチングが存在することと同値であることを導き、次にそれが表現グラフ G 上で X から Y へ Menger 型の完全リンクが存在することと同値であることを示す。まず、次の補題を用意する。

補題 n 次正方行列 $A=(a_{ij})$ が、

$$A=Q+T,$$

ただし、

- i) $Q=(q_{ij})$ の要素は有理数、
- ii) $T=(t_{ij})$ の非零要素は“一般的”，すなわち、有理数体上で代数的に独立、
- iii) Q の、零行も零列も含まない正方小行列は正則の形に分解できるとする。行番号 $\{1, \dots, n\}$ を左端点集合、列番号 $\{1, \dots, n\}$ を右端点集合とし、 $a_{ij} \neq 0$ のとき i と j を結ぶ枝が存在するような 2 部グラフを考える。このとき、 $\det A \neq 0$ であるための必要十分条件は、この 2 部グラフ上に完全マッチングが存在することである。■

証明 行列式の定義に従って

$$\det A = \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) \prod_{i=1}^n a_{i\sigma(i)}, \quad (2.7)$$

(S_n は n 次対称群) と展開する。

[必要性] $\det A \neq 0$ ならば (2.7) の中に非零項がある。すなわち、ある $\tau \in S_n$ に対して、 $a_{i\tau(i)} \neq 0 (i=1, \dots, n)$ であり、2 部グラフ上には $\{(i, \tau(i)), i=1, \dots, n\}$ なる完全マッチングが存在する。

[十分性] $A=Q+T$ により、(2.7) は

$$\det A = \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) \prod_{i=1}^n (q_{i\sigma(i)} + t_{i\sigma(i)}) \quad (2.8)$$

と書ける。この右辺をさらに展開して t_{ij} に関する同類項にまとめると、各項の係数は (符号を除いて) Q の小行列式に一致する。仮定 i) により各項の係数は有理数であるから、仮定 ii) により、非零項が打消し合うことはない。いま、2 部グラフ上に完全マッチング $\{(i, \tau(i)), i=1, \dots, n\}$ があるとすれば、ある $I \subset N \equiv \{1, \dots, n\}$ に対して

$$\prod_{i \in N-I} q_{i\tau(i)} \prod_{i \in I} t_{i\tau(i)}$$

は 0 でない。したがって、 $Q=(q_{ij})$ の $i \in N-I, j \in N-\tau(I) (\tau(I) \equiv \{\tau(i) | i \in I\})$ に対応する正方小行列の各行には非零要素 $q_{i\tau(i)}$ が存在するから、仮定 iii) により、(2.8) における $\prod_{i \in I} t_{i\tau(i)}$ の係数は 0 でない。ゆえに $\det A \neq 0$ である。 (証終)

連立方程式の構造的可解性の条件は、まず、その表現グラフ G の随伴 2 部グラフ \tilde{G} に対する条件として

次のように述べられる。

定理 2.2 標準形の連立方程式が構造的に可解であるための必要十分条件は、その表現グラフの随伴 2 部グラフ上に完全マッチングが存在することである。■

証明 連立方程式の表現グラフ G 、およびその随伴 2 部グラフ \tilde{G} の定義と、“一般性”の仮定から、(2.6) の行列 J の非零要素と \tilde{G} の枝が対応している。“一般性”の仮定により、 $J(g, u) - I$ の対角成分が恒等的には 0 でないから、 \tilde{G} 上で u_i と u_i^* を結ぶ枝が存在する。

J は、 $J=Q+T$ 、ただし

$$Q = \begin{bmatrix} O & O \\ O & -I \end{bmatrix}, \quad T = \begin{bmatrix} J(f, x) & J(f, u) \\ J(g, x) & J(g, u) \end{bmatrix},$$

と書ける。この分解は、“一般性”の仮定により、補題の条件を満たすので、構造的可解性の条件 $\det J \neq 0$ (定理 2.1) が \tilde{G} 上の完全マッチングの存在と同値であることがわかる。 (証終)

上の定理の条件を、直接、表現グラフの言葉で述べるとどうなるかを示すのが、本論文の主題の一つである。

一般のグラフ G と、その点集合の部分集合 $X, Y (X \cap Y = \emptyset)$ を考える。 X から Y への Menger 型リンクとは、 X に属する点から Y に属する点に至る (共通な点をもたないという意味で) 互いに素な有向道の集まりを言う。(Menger 型リンクには種々の変種があるが^{12), 13)}、本論文では上のような directed-path, vertex-disjoint 型を単に Menger 型と呼ぶ。) リンクに含まれる X から Y への有向道の数をリンクの大きさといい、大きさが最大のを最大リンク、 $|X|=|Y|$ のとき大きさが $|X|$ に等しいものを完全リンクと呼ぶ。

定理 2.3 標準形の連立方程式が構造的に可解であるための必要十分条件は、その表現グラフにおいて、極大点の集合 X とパラメタに対応する極小点の集合 Y を結ぶ Menger 型完全リンクが存在することである。

証明 定理 2.2 により、表現グラフ G 上の Menger 型完全リンクの存在と随伴 2 部グラフ \tilde{G} 上の完全マッチングの存在が同値であることを示せばよい。この同値性は、ネットワーク・フロー理論において良く知られた事実である^{12), 13)}が、念のため、証明を簡単に記しておく。

\tilde{G} 上に完全マッチングが存在すれば $M=N$ で、任意の $x_j (j=1, \dots, N)$ に対して、マッチングに属す枝

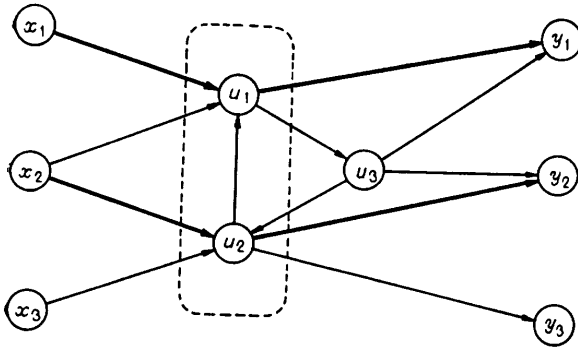


図3 例題(**)の表現グラフG

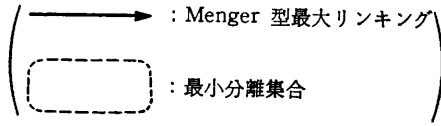
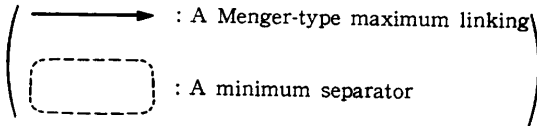


Fig. 3 Representation graph G of Example (**).



の列 $(x_j, u_{j_1}^*), (u_{j_1}, u_{j_2}^*), \dots, (u_{j_m}, y_{\sigma(j)}^*)$ が存在し、異なる x_j に対してこれらは共通の枝をもたない。したがって、 \tilde{G} 上の完全マッチングから G 上の Menger 型完全リンク $\{(x_j, u_{j_1}, \dots, u_{j_m}, y_{\sigma(j)})\}_{j=1}^N$ が定まる。逆に、 G 上に Menger 型完全リンクが存在すれば $M=N$ で、これから上の対応によって \tilde{G} 上にマッチングが定まる。リンクに含まれていない点 u_i については (u_i, u_i^*) なる枝をマッチングに添加すれば、 \tilde{G} 上の完全マッチングが得られる。(証終)

例題(*)において、その表現グラフ G 上には $x_1 \rightarrow y_1, x_2 \rightarrow u_2 \rightarrow u_1 \rightarrow y_2, x_3 \rightarrow u_4 \rightarrow y_3$ なる Menger 型完全リンクが存在するから(図1)、この連立方程式は構造的に可解である。この完全リンクに対応して、随伴2部グラフ \tilde{G} 上には、完全マッチング $(x_1, y_1^*); (x_2, u_2^*), (u_2, u_1^*), (u_1, y_2^*); (x_3, u_4^*), (u_4, y_3^*); (u_3, u_3^*)$ が存在する(図2)。

次に構造的に可解でない例を考えよう。連立方程式

$$\begin{cases} y_1 = f_1(u_1, u_3) \\ y_2 = f_2(u_2, u_3) \\ y_3 = f_3(u_2) \\ u_1 = g_1(x_1, x_2, u_2) \\ u_2 = g_2(x_2, x_3, u_3) \\ u_3 = g_3(u_1) \end{cases} \quad (**)$$

の表現グラフ G は図3のようになり、任意の $x_j (j=1, 2, 3)$ から任意の $y_i (i=1, 2, 3)$ へ有向道が存在する。

しかし、 $X = \{x_1, x_2, x_3\}$ から $Y = \{y_1, y_2, y_3\}$ への Menger 型最大リンクの大きさは2であって、完全リンクが存在しないので、定理2.3によって、(**)は構造的に可解でないことがわかる。このことは、入力端 X のもつ三つの自由度が、 G の構造からわかるように、内部の2変数 u_1, u_2 に縮約されてしまうので、任意に与えられた三つのパラメタ値 y_1, y_2, y_3 を満たすように x_1, x_2, x_3 の値を調節することは一般には不可能であるためであると理解できる。

グラフ G と、その点集合の部分集合 $X, Y (X \cap Y = \emptyset)$ を考える。 (X, Y) の分離集合とは、 G の点集合の部分集合であって、 X の点から Y の点へ至る任意の有向道と共通の点をもつものをいう。要素数が最小の分離集合を最小分離集合という。リンクと分離集合の間に次の関係が成り立つことはよく知られた事実である。

定理 2.4 (Menger の定理^{12), 13)} グラフ G の点集合の部分集合 $X, Y (X \cap Y = \emptyset)$ に対して、 X から Y への Menger 型最大リンクの大きさは、 (X, Y) の最小分離集合の大きさに等しい。■

例題(**)の表現グラフ G (図3)において、 $\{u_1, u_2\}$ は (X, Y) の最小分離集合である。連立方程式(2.1)の表現グラフにおける (X, Y) の最小分離集合の大き

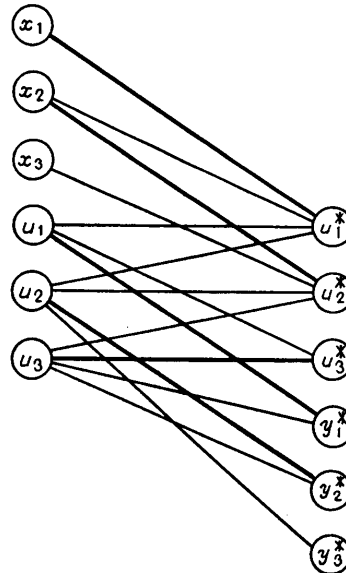


図4 例題(**)の表現グラフGの随伴2部グラフG-tilde (——— : 最大マッチング)

Fig. 4 Associated bipartite graph \tilde{G} of the representation graph G of Example (**).

(——— : A maximum matching)

さは、その系の実質的に有効な自由度と解釈することができる。したがって、構造的に可解でない連立方程式に対しても、表現グラフ上で最小分離集合を求めることによって、連立方程式が可解でないことの原因を具体的に知ることができる。

ちなみに、例題(**)の表現グラフ G の随伴2部グラフ \tilde{G} は図4に示すようになり、この上には完全マッチングが存在しない。このことから、定理2.2により、(**)が構造的に可解でないことがわかる。

標準形の連立方程式が与えられたとき、その表現グラフ G に含まれる点数 V は変数の数 $M+N+K$ に等しく、枝数 E は各変数が連立方程式の右辺に実質的に現われる回数の和に等しい。ところで、表現グラフ G 上で Menger 型最大リンクおよび最小分離集合を一つ求める問題は、特殊な形の最大流問題として定式化でき、 $O(E\sqrt{V})$ の手間で解ける¹⁴⁾。随伴2部グラフ \tilde{G} 上で最大マッチングを求める手間も、これとほぼ同じである¹⁵⁾。

3. 連立方程式のブロック三角化

3.1 L 分解

構造的に可解な連立方程式をブロック三角化して効率よく解くための手順を示す。まず、一般のグラフ G とその点集合の部分集合 $X, Y(X \cap Y = \emptyset)$ で X から Y への Menger 型完全リンクが存在するようなものが与えられたとき、 G の (X, Y) に関するL分解を次のように定義する。 X から Y への Menger 型完全リンクを一つとり、そのリンクで対応づけられる $(x \in X, y \in Y)$ に対して、 y から x へ枝を付加して得られるグラフの強連結成分分解によって定まる G の点集合の分割を、その半順序とともに、 G のL分解と呼ぶ。この分解の一意性について次の定理が成り立つ。定理3.1 Menger 型完全リンクのとり方によらず、L分解は一意的に定まる。■

証明 G 上のある Menger 型完全リンクで x_i と $y_i(i=1, \dots, N)$ が対応し、別の完全リンクで x_i と $y_{\sigma(i)}(i=1, \dots, N)$ が対応しているとする(σ は N 次の置換)。第一のリンクに従い、 G に N 本の枝 $(y_i, x_i)(i=1, \dots, N)$ をつけ加えて作られるグラフ G^* 上で、 $y_{\sigma(i)}$ から x_i への有向道が存在することを示せばいい。(なぜならば、これで、リンク $\{(x_i, y_i), i=1, \dots, N\}$ に関して作られる半順序集合は $\{(x_i, y_{\sigma(i)}), i=1, \dots, N\}$ に関して作られるものの準同型像になっていることがわかる；そして、両者の役割を入れ換え

れば逆もいえるから。)任意の i に対して、ある非負整数 p が存在して $\sigma^p(i)=i$ となる。リンクの定義により、 G 上で x_i から $y_{\sigma(i)}$ へ有向道が存在するから、 G^* には $y_{\sigma(i)} \rightsquigarrow x_{\sigma(i)} \rightarrow y_{\sigma^2(i)} \rightsquigarrow x_{\sigma^2(i)} \rightarrow \dots \rightarrow y_{\sigma^{p-1}(i)} \rightsquigarrow x_{\sigma^{p-1}(i)} \rightarrow y_i \rightsquigarrow x_i$ (ただし、 \rightsquigarrow は第一のリンクに対応して付加した枝)なる、 $y_{\sigma(i)}$ から x_i への有向道が存在することがわかる。(証終)

前節に示した方法によって構造的に可解と判明した連立方程式は、表現グラフをL分解することによって、階層構造をもつ部分問題に一意的に分解される。すなわち、L分解によって得られた半順序によって連立方程式がブロック三角化され、効率的な計算手順が定められる。グラフの強連結成分分解は、枝数に比例する程度の手間で実行できる¹⁶⁾。

例題(*)にL分解を適用すると、表現グラフ G は図1に点線で示すように2つの部分に分かれる。したがって、連立方程式(*)を解くには、まず、 x_1, x_2, u_1, u_2, u_3 を未知数とする連立方程式

$$\begin{cases} y_1 = f_1(x_1, u_1, u_3) \\ y_2 = f_2(u_1, u_3) \\ u_1 = g_1(x_1, u_2) \\ u_2 = g_2(x_1, x_2, u_3) \\ u_3 = g_3(u_1) \end{cases} \quad (*1)$$

を解き、そこで得られた x_2, u_3 の値を用いて、次に

$$\begin{cases} y_3 = f_3(x_2, u_3, u_4) \\ u_4 = g_4(x_2, x_3, u_3) \end{cases} \quad (*2)$$

から、 x_2, u_4 の値を定めればよい。

連立方程式の表現グラフをL分解することによって得られる部分問題をその半順序に従って解いていくとき、その部分問題に内在する未知数は、もとの表現グラフのL分解においてその部分問題に対応する成分内の点だけである。さらに、こうして得られる部分問題は再び標準形の連立方程式であり、その表現グラフはもとの連立方程式の表現グラフにおいて、その部分問題に内在する未知数に対応する点、およびそれらの点を両端点とする枝から成る部分グラフである。

3.2 簡約連立方程式

標準形の連立方程式、あるいはL分解によって得られた部分問題を数値的に効率よく解くために、本質的な未知数の数を減らす工夫が有効な補助手段となる。この工夫については、すでに文献1), 2)でも触れられているが、本論文で展開した理論を実用化するためには不可欠なものであるので、本論文の記号を用いて以下に略記する。

表現グラフが閉路を含まなければ、極大点 $x_i (i=1, \dots, N)$ の値を任意に与えると、グラフの構造によって定まる順序に従って代入計算だけを行うことにより極小点 $y_i (i=1, \dots, M)$ の値を計算できる。たとえば、例題(*)の第二の部分問題(*2)の表現グラフ(図1)は閉路を含まず、 x_3 の値を任意に与えると、その値とすでに定まっている x_2, u_3 の値を用いて g_4 を計算すれば u_4 が定まり、同様に、 u_4, x_2, u_3 の値を用いて f_3 を計算することによって y_3 が定まる。すなわち、表現グラフが閉路を含まなければ、 $u_k (k=1, \dots, K)$ は単に計算過程に現われる中間的な変数であって、実際に“解かねばならない”連立方程式は $x_j (j=1, \dots, N)$ だけを未知数とする

$$y_i = F_i(\mathbf{x}) \quad (i=1, \dots, M)$$

の形になる。ここで F_i は、与えられた関数 $f_i (i=1, \dots, M)$, $g_k (k=1, \dots, K)$ と表現グラフの構造から代入計算だけで計算できる関数である。この形にすることによって未知数の数が大幅に減少し、Newton 法系統の反復法などによって連立方程式を解く際に計算量が少なくて済む。

表現グラフが閉路を含む場合には、 x_j の値から代入計算だけによって y_i の値を定めることができない。すなわち、閉路の存在は“解かねばならない”方程式の存在を意味する。たとえば、例題(*1)の表現グラフ(図1)は、 u_1, u_2, u_3 から成る閉路を含む。そこで、反復法によって連立方程式(*1)を解くには、 x_1, x_2 のほかに閉路を切るような変数、たとえば u_1 の値を仮定して代入計算によって y_1, y_2 および u_1 を求めたとき、 y_1, y_2 が与えられた値に、また u_1 が最初仮定した値に一致するようにすればよい。これは、表現グラフ上で u_1 の点を極大点 u_1 と極小点 \bar{u}_1 の二つに分けて(図5)、閉路のないグラフを作り、そのグラフの極大点 x_1, x_2, u_1 から代入計算によって極小点 y_1, y_2, \bar{u}_1 の値を定めることに相当する。

一般に閉路を含む表現グラフに対して、いくつかの変数 $w_d (d=1, \dots, D)$ を選んで上に示したように極大点と極小点に分けることによって、閉路をもたないグラフを作ることができる。このグラフを誘導グラフと呼ぶ。(閉路を除くために選ばれる変数 w_d は、文献1), 2)においては〈DD〉型変数、文献17)においては cutpoint と呼ばれている。)このとき、“解かねばならない”連立方程式は $x_j (j=1, \dots, N)$ と $w_d (d=1, \dots, D)$ だけを未知数とする

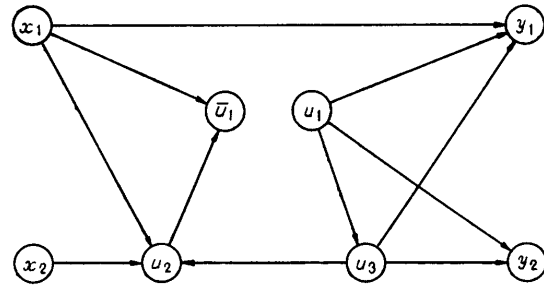


図5 例題(*1)の誘導グラフ
(u_1 を〈DD〉型とした場合)

Fig. 5 The derived graph of Example (*1).
(u_1 is chosen as a cutpoint, or a vertex of 〈DD〉 type.)

$$\begin{cases} y_i = F_i(\mathbf{x}, \mathbf{w}) & (i=1, \dots, M) \\ w_d = G_d(\mathbf{x}, \mathbf{w}) & (d=1, \dots, D) \end{cases}$$

の形になる。ここで、 F_i, G_d は与えられた関数 $f_i (i=1, \dots, M)$, $g_k (k=1, \dots, K)$ と誘導グラフの構造から代入計算だけで計算できる関数である。この連立方程式を簡約連立方程式と呼ぶ。本質的な未知数の数は $N+D$ であり、もとの連立方程式の未知数の数 $N+K$ に比べて通常は大幅に減少する。

簡約連立方程式に含まれる未知数の数 $N+D$ を最小にするには、閉路を切るために選ぶ変数の数 D を最小にすればよい。しかし、この問題はグラフ上の最小帰還点集合 (minimum feedback vertex set) を求める問題であり、NP-完全であることが知られている¹⁸⁾。すなわち、この問題に対しては効率のよい算法は知られていないので、適当な発見的方法によって D が小さくなるようにすればよい^{17), 19), 20)}。

L分解によって分解不能な成分についても、閉路の切り方(〈DD〉型変数の選び方)によっては、さらに半順序のついた部分問題に分けられることもあるが、その分解は一般には一意でない。

4. む す び

本論文では、標準形の連立方程式に対して、その構造的可解性の判定、およびブロック三角化のための、グラフ論的手法を提案した。この手法は、次のようにして、化学プロセスなどの大規模システムの解析に応用できる。

システムは、その状態を記述する変数の間の関数関係の組で表現されるとする。システムをある条件下で動作させたときの振舞を調べたり、あるいは出力を指定したときに必要な入力を求めたりするシミュレーションとは、システム内のいくつかの変数の値を指定し

たときに、システムを定義する関数関係を満たすように、残った変数を未知数とする連立方程式を解くことである。この方程式は、表現上の適当な修正を施すことによって標準形となしうるので、“一般性”の仮定の妥当性に対する考察の後に、本論文で提案した手法が適用できる。

連立方程式のブロック三角化のために Menger 型完全リンクングから L 分解を定義したが、この分解は、ある意味で、表現グラフの内部構造を無視したものである。さらに精密な分解が、Menger 型リンクング、特に、最小分離集合の構造に注目することによって得られる。このことに関する詳しい議論、およびそれと閉路の切り方との関係に関するより深い結果は、引続いて報告する予定である。

なお、本研究の一部は文部省科学研究費補助金：総合研究 A 00535012 (昭和 56 年度)「電子回路のシミュレーションに関する基礎研究」の援助のもとに行われたものである。

参 考 文 献

- 1) Iri, M., Tsunekawa, J. and Yajima, K.: The Graphical Techniques Used for Chemical Process Simulator "JUSE GIFS", Information Processing 71 (Proc. IFIP Congress 71), Vol. 2 (Applications), pp. 1150-1155 (1972).
- 2) 恒川純吉: ラージスケールシステムのグラフ論的分割, オペレーションズ・リサーチ, Vol. 25, pp. 788-793 (1980).
- 3) Harary, F.: A Graph Theoretic Approach to Matrix Inversion by Partitioning, Numer. Math., Vol. 4, pp. 128-135 (1962).
- 4) Dulmage, A. L. and Mendelsohn, N. S.: On the Inversion of Sparse Matrices, Math. Comput., Vol. 16, pp. 494-496 (1962).
- 5) Hellerman, E. and Rarick, D. C.: The Partitioned Preassigned Pivot Procedure (P^4), In "Sparse Matrices and Their Applications (D. J. Rose and R. A. Willoughby, eds.)", Plenum Press, New York, pp. 67-76 (1972).
- 6) Steward, D. V.: On an Approach to Techniques for the Analysis of the Structure of Large Systems of Equations, SIAM Review, Vol. 4, pp. 321-342 (1962).
- 7) Steward, D. V.: Partitioning and Tearing Systems of Equations, SIAM J. Numer. Anal., Ser. B 2, pp. 345-365 (1965).
- 8) 伊理正夫, 富沢信明: 回路網理論の基礎的諸問題へのマトロイドによる統一的接近法, 電子通信学会論文誌, Vol. 58-A, pp. 33-40 (1975).
- 9) Recski, A.: Sufficient Conditions for the Unique Solvability of Linear Networks Containing Memoryless 2-Ports, Circuit Theory and Appl., Vol. 8, pp. 95-103 (1980).
- 10) Sugihara, K.: On Redundant Bracing in Plane Skeletal Structures, Bul. Electrotechnical Lab., Vol. 44, Nos. 5, 6 (1980).
- 11) 伊理正夫, 韓 太舜: 線形代数, 教育出版, 東京 (1977).
- 12) Ford, L. R., Jr. and Fulkerson, D. R.: Flows in Networks, Princeton Univ. Press, Princeton (1962).
- 13) Iri, M.: Network Flow, Transportation and Scheduling, Academic Press, New York (1969).
- 14) Even, S. and Tarjan, R. E.: Network Flow and Testing Graph Connectivity, SIAM J. Comput., Vol. 4, pp. 507-518 (1973).
- 15) Hopcroft, J. E. and Karp, R. M.: An $n^{5/2}$ Algorithm for Maximum Matchings in Bipartite Graphs, SIAM J. Comput., Vol. 2, pp. 225-231 (1973).
- 16) Aho, A. V., Hopcroft, J. E. and Ullman, J. D.: The Design and Analysis of Computer Algorithms. Addison-Wesley, Reading (1974).
- 17) Shamir, A.: A Linear Time Algorithm for Finding Minimum Cutsets in Reducible Graphs, SIAM J. Comput., Vol. 8, pp. 645-655 (1979).
- 18) Garey, M. R. and Johnson, D. S.: Computers and Intractability, A Guide to the Theory of NP-Completeness, Freeman and Co., San Francisco (1979).
- 19) Lempel, A. and Cederbaum, I.: Minimum Feedback Arc and Vertex Sets of a Directed Graph, IEEE Trans. Circuit Theory, Vol. CT-13, pp. 399-403 (1966).
- 20) Lee, W. and Rudd, D. F.: On the Ordering of Recycles Calculations, A. I. Ch. E. Journal, Vol. 12, pp. 1184-1190 (1966).

(昭和 56 年 4 月 10 日受付)

(昭和 56 年 9 月 7 日採録)