

Intersection-set patterns-linear programming approach, application to statistics

M. Deza

文責者まえがき

Mikhail Deza 博士は、フランスの中央国立科学研究所(CNRS)およびパリ大学第6学部(数学, 物理, 化学分野)に属しておられ, 日本学術振興会の日仏科学協力事業研究者交換計画の一環として来日された方です。

専門は数学ですが, 符号理論や(実験計画法の)デザインの構成や存在問題およびマトロイド理論を, より抽象的な組合せ数学の見地から研究されています。

符号理論におけるコードの構成, 実験計画法でのデザインの構成やマトロイド問題は, これからの情報工学の基礎をなすもので, きわめて豊富な応用をもたらすと思われていますが, それらは抽象化して考えると結局は, ある根源集合(有限)の部分集合の, ある望ましい条件を満たす, 族の性質を研究したり, そのような族を構成するという問題に帰着されてしまいます。つまり有限集合の部分集合の族の研究であるといえます。

たとえば実験計画法でよく使われる BIB(balanced incomplete block)とよばれるものは, 根源集合(basic set)を $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_v\}$ として, Ω の部分集合の族, つまり,

$$B = \{B_1, \dots, B_b\}, B_j \subseteq \Omega, 1 \leq j \leq b$$

で, つぎの条件を満たすものをいいます;

- (i) $|B_j| = k, 1 \leq j \leq b$ (集合 A に対して $|A|$ は A の大きさ, つまり A の要素の総数)
- (ii) $|\{j : B_j \ni \omega_i, 1 \leq j \leq b\}| = r, 1 \leq i \leq v$
- (iii) $|\{l : B_l \ni \omega_i, B_l \ni \omega_j, 1 \leq l \leq b\}| = \lambda$
 $1 \leq i, j \leq v, i \neq j$

ここで ω_i を品種, B_j をブロックとよぶならわしがあります。たとえば $\Omega = \{0, 1, 2, \dots, 6\}$ とすると,

$$B_1 = \{0, 1, 3\}, B_2 = \{1, 2, 4\}, B_3 = \{2, 3, 5\},$$

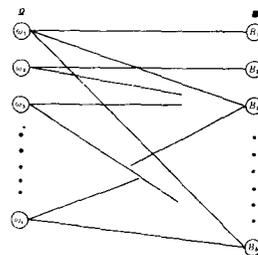
$$B_4 = \{3, 4, 6\}, B_5 = \{4, 5, 0\}, B_6 = \{5, 6, 1\}, B_7 = \{6, 0, 2\}$$

とすると, $B = \{B_1, B_2, \dots, B_7\}$ は BIB となります。

一般に部分の族を図のように2部グラフと見ることもできます。むろん $\omega_i \in B_j$ なら ω_i と B_j とを結ぶ枝があり, $\omega_i \notin B_j$ ならそのような枝がないと見ます。そうすると, Ω と B とをまったく双対的に見ることができ, ω_i をブロック, B_j を品種と見なすこともできるわけです。

さてこのような BIB の存在条件は整数上の2次形式の同値問題に帰着され (Hasse-Minkowski の定理), それはさらにある簡単な整数方程式の解の存在問題に帰着される (Bruck, Ryser, Chowla の定理) という有名な問題があります [1]。

このような問題を BIB にかぎらずもっと一般的な部分集合の族に拡張して考えたとき, どのような方法がとられるべきか, どんな数学上の問題に関連づけられるのか, ということをお考察するのがこの講演の主目的で, ここでは主として OR に関係の深い; 整数計画, convex cone とその dual cone (polar cone), グラフ理論, 2次形式への関連づけが行なわれました。



($\omega_i \in B_j$ のとき, そしてそのときのみで) ω_i と B_j とを結ぶ。

intersection pattern と intersection 行列

$\{A_0, A_1, \dots, A_{m-1}\}$ をある basic set の部分集合の族としよう。

$$\tilde{i}j = |A_i \cap A_j| \quad (1)$$

とするとき、

$m \times m$ 行列 $[\tilde{i}j]$ を intersection 行列,
 k 次元ベクトル $y = [\tilde{00}, \tilde{01}, \dots, (\tilde{0}, \tilde{m-1}), \tilde{11}, \tilde{12}, \dots, (\tilde{m-1}, \tilde{m-1})]$ を intersection pattern と
 いう。 $k = m(m+1)/2$ 。

例 intersection 行列 intersection pattern

$$M = \begin{pmatrix} \tilde{00} & \tilde{01} & \tilde{02} \\ \tilde{10} & \tilde{11} & \tilde{12} \\ \tilde{20} & \tilde{21} & \tilde{22} \end{pmatrix} \quad y = [\tilde{00}, \tilde{01}, \tilde{02}, \tilde{11}, \tilde{12}, \tilde{22}] \quad (2)$$

$$M = \begin{bmatrix} 5 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 2 \\ 3 & 2 & 6 \end{bmatrix} \quad y = [5, 2, 3, 4, 2, 6] \quad (3)$$

A_i の characteristic ベクトルを x_i とする、つまり

$$n \text{ 次元ベクトル} \\ A_i \leftrightarrow x_i = [1 \ 0 \ 1 \ 1 \ 0 \ \dots]$$

(A_i が basic set の第 j 番目の要素を含むとき、そしてそのときにかぎり、 x_i の第 j 成分が 1, 他は 0)

とすると、

$$X = \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_{m-1} \end{bmatrix} \quad m \times n \{0, 1\} \text{ 行列} \quad (4)$$

で $\{A_0, A_1, \dots, A_{m-1}\}$ は特徴づけられる。この intersection 行列は明らかに $M = XX^T$ である。

われわれのおもな目標は、 M (部分集合の族の特性) を与えて、これを実現する、つまり $M = XX^T$ となるような $(0, 1$ を要素とする) X を見つけること、またはその存在条件などを問うことである。この場合 m は固定するが、basic set の大きさ n は (固定することもあるが) ここでは自由であるとしておく。むろん最小の n で達成することが望ましい。

たとえば上に与えた (3) の M を実現する X は確かに存在して、

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (5)$$

である。

[文責者注] はじめに述べた BIB との関連を見よう。

2部グラフ的に考えて ω_i を A_i と見なすと、BIB の条件 (ii), (iii) は M として

$$M = \begin{bmatrix} r & \lambda & \lambda & \dots & \lambda \\ \lambda & r & \lambda & \dots & \lambda \\ \lambda & \lambda & r & \dots & \lambda \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda & \lambda & \lambda & \dots & r \end{bmatrix} = (r-\lambda)I + \lambda J$$

(I は $v \times v$ 単位行列、 J は (すべての要素が 1 である) ような行列)

とすることに帰着される。条件 (i) は X の列ベクトルのウェイトが一定で k に等しいことを要請しているから $E_m X = kE_n$ と書ける (ここで E_i はすべての成分が 1 であるような i 次元横ベクトル)。

したがって BIB の存在条件は $M = XX^T$, $E_m X = kE_n$ を満たす $v \times b$ の $(0, 1)$ 行列 X が存在するかということになる。

relaxation

X は部分集合 A_i の characteristic ベクトルの集まりであり、0, 1 から構成されているから、 $M = XX^T$ を満たす X を $(0, 1)$ 行列の中から見つけねばならないことはもちろんであるが、数学的にそれはきわめてむずかしい。そこで 0, 1 という制限を緩和 (relax) して、

$$N = \{0, 1, 2, \dots\}, \quad Z = \{0, \pm 1, \pm 2, \dots\}, \quad Q_+ = \{\text{非負の有理数}\}, \\ R_+ = \{\text{非負の実数}\}, \quad Q = \{\text{有理数}\}, \quad R = \{\text{実数}\}, \quad C = \{\text{複素数}\}$$

という形に拡張してゆこう。

そして任意の $S \subseteq C$ に対して、

$$T_S = \{XX^T : X, m \times n \text{ 行列 over } S, n=1, 2, \dots\} \quad (6)$$

とすると、

$$T_{\{0,1\}} \subseteq T_N \subseteq T_{Q_+} \subseteq T_{R_+} \subseteq T_C \\ \cap \quad \cap \\ T_{\{-1,1\}} \subseteq T_Z \subseteq T_Q \dots \dots \dots \subseteq T_R \subseteq T_C$$

のような包含関係がある。

さて $T_{\{0,1\}}$ はその元 M の和を、普通の行列のように要素同士の和と考えると、その和に関して閉じているから monoid となる。したがって $(N^{m^2}, +)$ の submonoid となる。(和に関して閉じていることは、 $X_1, X_2 \in T_{\{0,1\}}$ に対して $X_1 X_1^T + X_2 X_2^T = X_3 X_3^T$ となる X_3 が $T_{\{0,1\}}$ の中にあることをいえばよいが、これは $X_3 = [X_1, X_2]$ とすればよいだろう——文責者注)。 T_N などについても同様だから、上の包含関係は submonoid としてのそれでもある。

distance pattern

以上の議論はすべて $\tilde{i}j = |A_i \cap A_j|$ にもとづいて行な

われたが、対称差(symmetric difference)の大きさ

$$i^*j^* = |(A_i - A_j) \cup (A_j - A_i)|$$

に対しても同様に進められる。これは A_i, A_j の characteristic ベクトル x_i と x_j をコードと見たときの Hamming 距離に他ならない。そこで i^*j^* の場合の(3)式の M や y に相当するものを、それぞれ distance 行列および distance pattern という。

ただしこの場合 $A_m = \phi$ (空集合)を追加して、distance 行列は $(m+1) \times (m+1)$ とし、distance pattern は、

$$(0^*, \dots, 0^*_m, 1^*, \dots, 1^*_m, \dots, (m-2, m-1)^*)$$

とする。これは $k=m(m+1)/2$ 次元となる。

$$\begin{aligned} \widetilde{i^*j^*} &\text{ と } i^*j^* \text{ の間には} \\ \widetilde{i^*j^*} &= (\widetilde{m^*i^*} + \widetilde{m^*j^*} - i^*j^*)/2 \\ i^*j^* &= \widetilde{i^*i^*} + \widetilde{j^*j^*} - 2\widetilde{i^*j^*} \end{aligned}$$

という関係があるから、同一の情報をもつものである。

intersection pattern の表現行列

さてつぎに intersection pattern y ((2), (3)式)をうまく表現する行列を考えよう。

$l=2^m-1$ として $Q=\{1, 2, \dots, l\}$ としよう。 $q \in Q$ を 2進数展開して、

$$q = q_{(0)} + q_{(1)} \times 2 + \dots + q_{(m-1)} \times 2^{m-1} \quad (7)$$

として、 q を m 次元 $0,1$ ベクトル $[q_{(0)}, q_{(1)}, \dots, q_{(m-1)}]$ として表現することができる。このとき $\|q\|$ をこのベクトルの Hamming ウェイト(成分のうちの 1 の総数)とする。

さらに、

$$R = \{q \in Q : \|q\| \leq 2\} \quad (8)$$

とする。 R の大きさは明らかに $|R| = k = m(m+1)/2$ で intersection pattern の次元に一致する。

さて $r \in R, q \in Q$ の 2進数展開 $[r_{(0)}, r_{(1)}, \dots, r_{(m-1)}], [q_{(0)}, q_{(1)}, \dots, q_{(m-1)}]$ に対して、

$$r_{(i)} \leq q_{(i)}, \quad 0 \leq i \leq m-1 \quad (9)$$

のとき、そしてそのときにかぎって $e_{rq} = 1$, 他は $e_{rq} = 0$ とし、行列

$$E = [e_{rq}] \quad k \times l (0,1) \text{ 行列} \quad (10)$$

を考える。

ここで E の列の順序はどうでもよいが行の順序は intersection pattern の成分の順序((2)式)に呼応するよう

にきめる。例として $m=3$ の場合を考えると、 E はつぎのようになる (Q の元 q の 2進ベクトル表現は紙面の都合で列ベクトル、 R の元のそれは行ベクトルとして書いた。)

$$\begin{array}{c|cccccccc}
 & & & & & Q & & & \\
 & & & & & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 & & & & & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
 & & & & & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\
 \hline
 R & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\
 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\
 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\
 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1
 \end{array} = E \quad (11)$$

このとき、つぎの主要な性質が成り立つ。

命題 1 $y \in N^k$ が intersection pattern であるための必要十分条件は、

$$y^T = E x^T, \quad x \in N^l \quad (12)$$

とあらわされることである。(y, x は横ベクトルとしておく)。

例として(3)式の y に対応しては、

$$x = [2, 1, 1, 1, 1, 2, 1, 1] \quad (13)$$

を考えれば、明らかに $y^T = E x^T$ となる。

ここで x は intersection pattern y に対する characteristic 行列 X ((5)式)の列ベクトル中に、 Q のパターンが何回出現するかを示すものである。上の例でいえば、 Q の第 1 列 $[0 \ 0 \ 1]^T$ が X の列ベクトルの中に 2 回出現しているから、 x の第 1 成分を 2 としてある。また Q の第 2 列 $[0 \ 1 \ 0]^T$ が X の中に 1 回出現しているから x の第 2 成分が 1 としてある、...

なお R の定義(8)式で $\|q\| \leq 2$ とあるうちで、 $\|q\|=2$ は 2 つの characteristic ベクトル x_i, x_j の内積をとることに対応し、 $\|q\|=1$ は自分自身との内積をとることに対応している。また(11)式における R の元の順序は、

$$[0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ \dots] \leftrightarrow (i, j)$$

と対応させ、(2)式に示すような intersection pattern の順 $(0,0), (0,1), (0,2), (1,1), (1,2), (2,2)$ の順に配列してある。

[文責者注] 命題 1 に関連したような表現技法は符号理論などでもしばしば用いられる。たとえば Mc Donald の Modular 表現など [2] § 3.6。また 2進数展開は必ずしも本質的でなく、 Q としては $(0$ ベクトルを除く) m 次元 $(0,1)$ ベクトル全体を、 R としてはそのうちウェイトが 2 以下のものを全部とればよい。

intersection pattern の集合の convex hull

intersection pattern y のすべての集合 (m は固定)を Y としよう。つまり、

$$Y = \{y = E x; x \in N^l\} \quad (14)$$

とする。ここで(6)式のような $X(m \times n$ 行列)の形で考えているときは n が自由に選べるパラメータとして残っていたが(14)のような形にすると n があらわれてこないことに注意しよう(n は実は x の中に解消している)。 l は m によってきまる ($l=2^m-1$) から一定である。そうするとすぐ命題1の系としてつきが出る。

系 1 Y は $(\mathbb{N}^k, +)$ の submonoid である。

Y はむしろ k 次元ベクトル空間 \mathbb{R}^k の格子点の部分集合という点で整数計画の問題に関係づけられるが、いまその convex hull を $\text{conv } Y$ とかく。そうすると明らかに、

$$\text{conv } Y = ER^l_+ \quad (15)$$

で、

$$I = \mathbb{N}^k \cap \text{conv } Y \quad (16)$$

を pseudo-realisable なベクトルの集合とよぶ。そうするとつきが成立する。

命題 2 $I = \mathbb{N}^k \cap (\cup_{n \in \mathbb{P}} \frac{1}{n} Y)$ ($\mathbb{P} = \{1, 2, \dots\}$)。 (17)

I は一般には Y とは一致しない(おそらく $I \supsetneq Y$)。 I は1次(同次)不等式によって決定される cone 中の整数点全体として定義されるが、 Y は一般には1次同次式によってきまる cone 中の整数点全体としては定義されない(これは E の構造から明らかであろう)。この意味でわれわれの問題は普通の(整数計画で定式化できる)組合せ問題とは異なる(よりむずかしい)が、それにもかかわらず $\text{conv } Y$ は Y の特徴づけとしては最初の出発点になるであろう。

dual cone

$\text{conv } Y$ は原点を頂点とする polyhedral cone であるから、その dual cone(あるいは polar cone) \tilde{D} がただひとつきまる。つまり、

$$\tilde{D} = \{d \in \mathbb{R}^k : dy \geq 0, \forall y \in Y\} \quad (18)$$

したがって明らかに、

命題 3 $d \in \tilde{D}$ であるための必要十分条件は、

$$dE \geq 0. \quad (19)$$

かくして $\text{conv } Y$ あるいは \tilde{D} を特徴づけるものは(19)のような(同次)1次不等式であることがわかった。

いま任意の1つの $d \in \tilde{D}$ に対して、

$$F_d = \{y \in Y : dy = 0\} \quad (20)$$

とすると、 F_d は Y のいわゆる facet (切面)となる。一般に Y 全体より Y の facet を求めることが応用上は多い。とくに最小化問題に関してはこのことが主要である。われわれの問題では、(14)などでは x の成分の和 xE_l を最小化することが問題であろう。 xE_l は(6)などでは n に相当する。

こうすると相補スラックの定理と同様に、

系 3 $d \in \tilde{D}$ に対して、

$$F_d = \{Ex : x \in \mathbb{N}^l, x_i = 0 \text{ whenever } (dE)_i > 0\} \quad (21)$$

ここで $(dE)_i$ はベクトル dE の第 i 成分。

2次形式との関係

さてつきに2次形式との関係を見よう。

$$m = \{0, 1, \dots, m-1\} \quad (22)$$

として $L \subseteq m$ に対して、

$$\bar{L} = \{(i, j) : i \leq j, i \in L, j \in L\} \quad (23)$$

としておこう。このとき以上の議論からすぐつきが成り立つことがわかる。

命題 4 つぎの3つの条件はすべて同値である。

$c = (c_{00}, c_{01}, \dots, c_{0, m-1}, c_{11}, \dots, c_{m-1, m-1}) \in \mathbb{R}^k$ に対して、

(A) $c \in \tilde{D}$

$$(B) \sum_{(i, j) \in \bar{L}} c_{ij} \geq 0, \forall L \subseteq m \quad (24)$$

(C) 2次形式

$$f(z) = \sum_{(i, j) \in \bar{m}} c_{ij} z_i z_j \quad (25)$$

が任意の $z \in \{0, 1\}^m$ に対して常に非負。つまり $f(z)$ は $\{0, 1\}^m$ 上で非負定値。

上の条件(B)は、点集合 $m = \{0, 1, \dots, m-1\}$ からなる無方向完全グラフで各点にループをもつものを考え、その枝 (i, j) ($(i, j) \in \bar{m}$) (ループも含めて)の値 c_{ij} が付加されているとき、 m の任意の部分集合 L について、両端とも L に属している枝の値の和がつねに非負になるという条件に他ならない。

(A)は命題(3)より $cE \geq 0$ と同値であるが、(11)式の E の各列を見れば、これが条件(B)と同値であることはうなずけるであろう。また(C)は z_i, z_j が0, 1のみをとる変数であるから、(25)の右辺で z_i, z_j がともに1である

次号予告

特集 モデルを解剖する

「学」的問題と「術」的問題

ブラック・ボックスを透視する

ほどよく“うそ”を加味したモデル

家づくりとモデルづくり

個別モデルと標準モデル

似非モデルの功罪

モデルと解析手段との対峙

阿呆かしこなモデルと解析

鈴木義一郎

田畑 吉雄

若山 邦紘

森 雅夫

森村 英典

高橋 幸雄

逆瀬川浩孝

牧野 都治

ときにかぎって0でないから、これと(B)とが同値であることもそんなにむずかしい証明は必要としないだろう。

ま と め

われわれの問題、つまり M を与えて $M=XX^T$ なる $(0,1)$ 行列 X を求めることは一見簡単そうで実はきわめてむずかしい。一番簡単な BIB の問題ですら、そのほとんどがわかっていない。しかしそのうち1つでもわかればその応用はきわめて豊富なのである。

また M を intersection pattern というベクトルにのばした形で、その総体 Y がどんな特徴をもっているかを、convex cone, dual cone, 整数計画, 2次形式などいろいろな角度から眺めることができることがわかった。これらの表現を出発点として、少しずつではあるがいろいろな構造が明らかにされつつある [3][4]。また dual cone \tilde{D} の実際の解法には Fourier-Motzkin の消去法 [5][6] が利用される。

また distance pattern から出発しても、intersection pattern の方法とまったく並行的に話が進められ、さまざまな不等式の関連などが生み出される。

参 考 文 献

- [1] M. Hall, "Combinatorial Theory", Blaisdell (1967).
- [2] W.W. Peterson and E.J. Weldon, Jr. "Error Correcting Codes", second ed. MIT press(1972).
- [3] M. Deza and I. G. Rosenberg, "Intersection and distance patterns", CRM-702(1977).
- [4] M. Deza and I. G. Rosenberg, "Generalized intersection patterns", CRM-722(1977).
- [5] G. B. Dantzig, "Linear Programming and extensions", Princeton Univ. Press(1963).
- [6] H.P. Williams, "Fourier Motzkin elimination extension to integer programming problems", J. Combinatorial Theory(A)21(1976)118~123.
([3][4]は入手しにくいと思いますが、文責者のところにコピーがあります。)

(文責：早稲田大学システム科学研究所 高橋磐郎)