8.2　グラフとネットワーク

私はあるモデルをいつも最初に話すことにしている．なぜなら，そのモデルが長年に渡って度々登場し，かつ基本的で有用だと気づいたからだ．そのモデルはエッジで繋がれたノードからなり，グラフと呼ばれる．

通常の意味でのグラフは，関数 $f(x)$ を表すものである．ノードとエッジからなるここでのグラフは行列に関連する．本節では，グラフの**接続行列**を扱う．接続行列は，n 個のノードが m 本のエッジによってどのように接続されているかを表す．通常 $m > n$ であり，ノードの数よりもエッジの数が多い．

任意の $m \times n$ 行列に対して，$\mathbf{R}^n$ に 2 つ，$\mathbf{R}^m$ に 2 つの基本部分空間がある．それらは，A と A^{T} の行空間と零空間である．それらの**次元**は，線形代数における最も重要な定理と関係がある．その定理の 2 つ目の部分は，部分空間の**直交性**である．本節の目標は，グラフの例を用いて線形代数の基本定理を解説することである．

まず,（任意の行列に対する）4 つの部分空間を復習する．次に，**有向グラフ**とその**接続行列**を構成する．その次元を求めるのは簡単だ．しかし，我々が欲しいのは部分空間そのものである．そこで直交性が役に立つ．部分空間をそのもととなったグラフへ関連づけることが最も重要なのだ．接続行列に特化すると，線形代数の原理はキルヒホッフの原理となる．「電流」や「電圧」や「キルヒホッフ」という言葉にひるまないでほしい．これらの矩形行列が最適なのだ．

接続行列の要素はいずれも，0 か 1 か -1 のいずれかである．これは消去を行う間もずっと成り立つ．ピボットと乗数はすべて ± 1 である．したがって，$A = LU$ の L も U もまた $0, 1, -1$ からなり，零空間行列も同様である．4 つの部分空間の基底ベクトルはすべて，他では見られないほど単純な $0, 1, -1$ の要素からなる．教科書のためにでっちあげたのではない．純粋数学および応用数学における非常に本質的なモデルから，その行列は導かれるのである．

最初の接続行列を以下に示す．各行にある -1 と 1 とに注意せよ．この行列は，あるグラフの 6 つのエッジを横断する**電圧の差**をとるものである．この行列 A を構成するもととなった図 8.4 において，4 つのノードにおける電圧は x_1, x_2, x_3, x_4 である．U はその階段行列である：

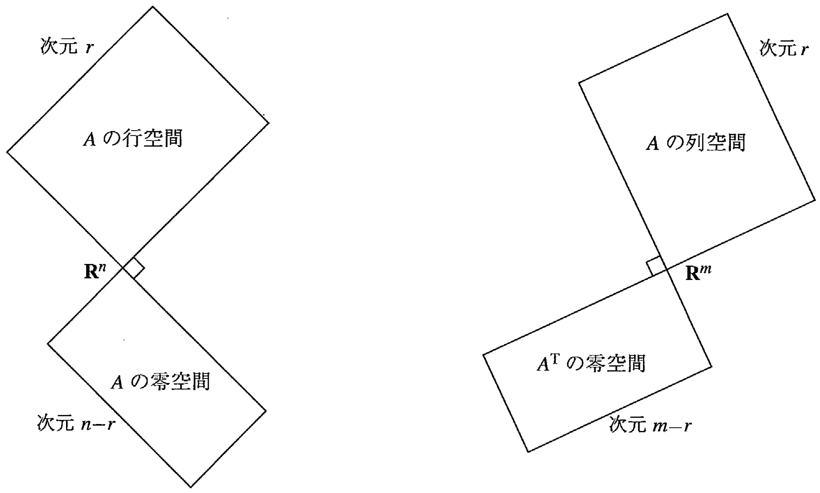


図 **8.3** 全体像： 4 つの部分空間と，それらの次元と直交性.

接続行列
6 エッジ
4 ノード
$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{-1} & \mathbf{1} & 0 & 0 \\ \mathbf{-1} & 0 & \mathbf{1} & 0 \\ 0 & \mathbf{-1} & \mathbf{1} & 0 \\ \mathbf{-1} & 0 & 0 & \mathbf{1} \\ 0 & \mathbf{-1} & 0 & \mathbf{1} \\ 0 & 0 & \mathbf{-1} & \mathbf{1} \end{bmatrix} \quad \text{を簡約すると} \quad U = \begin{bmatrix} \mathbf{-1} & \mathbf{1} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{-1} & \mathbf{1} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{-1} & \mathbf{1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

A と U の零空間は，$\boldsymbol{x} = (1,1,1,1)$ を通る直線である．A と U の列空間の次元は $r = 3$ である．ピボット行が行空間の基底である．

図 8.3 が表していることは他にもある．それは，部分空間が直交しているということだ．**零空間に含まれるどのベクトルも，行空間に含まれるどのベクトルとも直角に交わる**．このことは，m 個の等式 $A\boldsymbol{x} = \mathbf{0}$ から直接導かれる．上記の A と U に対しては，$\boldsymbol{x} = (1,1,1,1)$ がすべての行に直交しているので，$\boldsymbol{x}$ は行空間全体にも直交する．すなわち，電圧が等しければ，電流は生じない．

4 つの基本部分空間を用いる前に，それらの復習をしよう．核心は，ネットワークにおけるそれらの意味を理解することである．

ある $m \times n$ 行列が与えられる．その列は，$\mathbf{R}^m$ に含まれるベクトルである．それらの線形結合は**列空間** $\boldsymbol{C}(A)$ を作り，それは $\mathbf{R}^m$ の部分空間である．その線形結合は，行列–ベクトル積 $A\boldsymbol{x}$ そのものである．

A の行は，(行を列ベクトルとみなせば) $\mathbf{R}^n$ に含まれるベクトルである．それらの線形結合は **行空間** を作る．行を扱う不都合さを避けるため行列を転置すると，行空間は A^{T} の列空間 $\boldsymbol{C}(A^{\mathrm{T}})$ である．

線形代数における中心的な問題は，このように同じ数を列の見方と行の見方という 2 つの見方で見ることにある．

零空間 $\boldsymbol{N}(A)$ は，$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ を満たすような $\boldsymbol{x}$ のすべてを含む．これは，$\mathbf{R}^n$ の部分空間である．“左” 零空間は，$A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$ の解すべてを含む．ここで，$\boldsymbol{y}$ は要素を m 個持つので，$\boldsymbol{N}(A^{\mathrm{T}})$ は $\mathbf{R}^m$ の部分空間である．$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}A = \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}}$ と書くと，A の行の線形結合によって零の行を作る．4 つの部分空間を図 8.3 に示す．その図は，一方に $\mathbf{R}^n$ を表し，もう一方に $\mathbf{R}^m$ を表している．それらをつなぐものが A である．

その図に書かれていることは極めて重要だ．1 つ目は次元に関する事項であり，次元は線形代数の 2 つの中心的法則に従う：

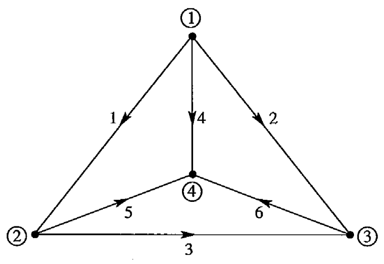
$$\dim \boldsymbol{C}(A) = \dim \boldsymbol{C}(A^{\mathrm{T}}) \quad \text{と} \quad \dim \boldsymbol{C}(A) + \dim \boldsymbol{N}(A) = n.$$

行空間の次元が r であるとき，零空間の次元は $n-r$ である．消去を行ってもこれら 2 つの空間は変わらず，階段行列 U から次元を数えることができる．ピボットを含む行と列がそれぞれ r ある．ピボットを含まない自由な列が $n-r$ あり，それらから零空間のベクトルが導かれる．

ここで復習した部分空間の性質は，任意の行列 A にあてはまる．例は特別な行列であったが，これからその例に集中しよう．その行列はあるグラフの接続行列であり，そのグラフから部分空間の意味を考える．

有向グラフと接続行列

図 8.4a は，$m = 6$ 本のエッジと $n = 4$ 個の頂点からなるグラフである．行列 A は 6×4 であり，どのノードがどのエッジで接続されているかを示す．要素 -1 と $+1$ は，各矢印の向きも表している（このグラフは有向グラフである）．A の第 1 行 $-1, 1, 0, 0$ により，エッジ 1 がノード 1 からノード 2 に至ることが示される：

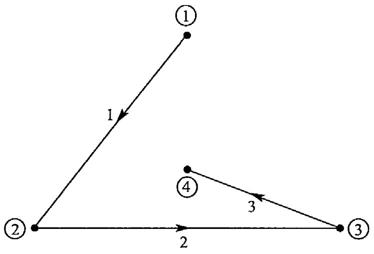


$$\begin{array}{cc} & \text{ノード} \\ & \begin{array}{cccc} ① & ② & ③ & ④ \end{array} \\ A = & \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{array} \quad \text{エッジ}$$

図 8.4a　$m = 6$ 本のエッジと $n = 4$ 個のノードからなる完全グラフ．

行数はエッジの数であり，列数はノードの数である．グラフを見れば，すぐに A を書き下すことができる．

2 つ目のグラフは，同じく 4 個のノードからなるが，3 本のエッジしかない．その接続行列は 3×4 である：



$$\begin{array}{cc} & \text{ノード} \\ & \text{①　②　③　④} \\ B = & \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{c} 1 \\ 2 \quad \text{エッジ} \\ 3 \end{array}$$

図 8.4b　3 本のエッジと 4 個のノードからなり，ループを含まない木．

1 つ目のグラフは**完全グラフ**であり，すべてのノード対があるエッジによって接続されている．2 つ目のグラフは**木**であり，そのグラフには**閉ループ**がない．それらは極端な 2 つのグラフである．エッジの最大数は $\frac{1}{2}n(n-1)$ であり，エッジの最小数（木）は $m = n-1$ である．

B の行は，U の行に対応しており，階段行列を見つけるのが簡単だ．**消去により，すべてのグラフは木へと簡約される**．ループは，U においては零行となる．1 つ目のグラフのエッジ 1, 2, 3 で作られるループから，零行が導かれることを見る．

$$\begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

その過程は典型的なものである．2 つのエッジがあるノードを共有しているとき，消去によってそのノードを通らない「ショートカットするエッジ」が生成される．グラフにこのショートカットするエッジがすでにあれば，消去によって零行ができる．そのようなエッジがなくなると，木が残る．

次の考え方が浮かぶだろう．**エッジがループをなすとき，行は線形従属である**．線形独立な行は木から生じる．これが行空間の鍵である．グラフが連結であると仮定し，矢印の向きは基本的には差を生じない．各エッジにおいて，矢印に沿った流れを「正」とし，逆の方向の流れを負とする．その流れは，電流や信号や力であり，油やガス，水であってもよい．

列空間について，差からなるベクトル $A\boldsymbol{x}$ を見る：

$$A\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_2 - x_1 \\ x_3 - x_1 \\ x_3 - x_2 \\ x_4 - x_1 \\ x_4 - x_2 \\ x_4 - x_3 \end{bmatrix}. \tag{1}$$

変数 x_1, x_2, x_3, x_4 は，そのノードにおけるポテンシャルまたは電位を表す．すると $A\boldsymbol{x}$ は，エッジを横切るポテンシャルの差または電位の差となり，それによって流れができる．これから，それぞれの部分空間の意味を調べる．

1　零空間には，$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ の解が含まれる．6 つの差のすべてが零である．これが意味することは，**4 つのポテンシャルがすべて等しい**ということだ．零空間に含まれる $\boldsymbol{x}$ はすべて，定数ベクトル (c, c, c, c) である．A の零空間は $\mathbf{R}^n$ における直線であり，その次元は $n - r = 1$ である．

2 つ目の接続行列 B の零空間も同じである．その零空間には $\mathbf{(1, 1, 1, 1)}$ が含まれる：

$$B\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

すべてのポテンシャルを同じ量 c だけ増やしたり減らしたりしても，差は変化しない．ポテンシャルに「任意定数」が含まれるからだ．次の関数に対する文と比較せよ．$f(x)$ を同じ量 C だけ増やしたり減らしたりでき，そのとき導関数は変化しない．不定積分に任意定数 C が含まれるからだ．

解析では，不定積分に「$+C$」を加えた．グラフ理論では，ポテンシャルのベクトル $\boldsymbol{x}$ に (c, c, c, c) を加える．線形代数では，$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の特殊解に零空間に含まれる任意のベクトル $\boldsymbol{x}_n$ を加える．

解析においては，積分の開始点を $x = a$ に固定すると「$+C$」は消える．同様に，$x_4 = 0$ と決めると零空間は消える．変数 x_4 がなくなり，同様に A と B の第 4 列がなくなる．電気工学の人は，ノード 4 が「接地された」と言うだろう．

2　行空間は，6 つの行による線形結合のすべてを含む．その次元は 6 ではない．等式 $r + (n - r) = n$ から $3 + 1 = 4$ とならなければならない．消去でも見たように，その階数は $r = 3$ である．3 本のエッジに加えてさらにエッジを追加すると，ループが作られるようになる．その新しい行は線形独立ではない．

行空間に $\boldsymbol{v} = (v_1, v_2, v_3, v_4)$ が含まれるかどうかをどのように判定すればいいか？時間のかかる方法は，行の線形結合をとることである．手早い方法は，直交性を利用することだ：

$\boldsymbol{v}$ が行空間に含まれるのは，零空間に含まれる $\mathbf{(1, 1, 1, 1)}$ と $\boldsymbol{v}$ が直交するときであり，かつそのときに限る．

ベクトル $\boldsymbol{v} = (0, 1, 2, 3)$ は，この判定に失敗する．その要素を足すと 6 になるからだ．ベクトル $(-6, 1, 2, 3)$ はこの判定に成功する．その要素の和が零であるので，ベクトルは行空間に含まれる．そのベクトルは，6 (第 1 行) + 5 (第 3 行) + 3 (第 6 行) に等しい．

A のどの行もその要素の和が零となるので，行空間に含まれるすべてのベクトルでも要素の和が零となる必要がある．