マトロイドの紹介

この記事の最終目標は "**最小全域木問題に対するアルゴリズムである Kruskal 法の正当性をマトロイドの側面から示すこと**" である.

初めに用語の定義をまとめて述べる.

Definition 1. 有限集合 E, 集合 E の部分集合族 (E の部分集合の集合) を $\mathcal{I}$ とする. このとき $(E,\mathcal{I})$ が以下の 3 つの条件を満たすとき**マトロイド (matroid)** であると言う.

(M1) $\emptyset \in \mathcal{I}$

(M2) $Y \in \mathcal{I}$ かつ $X \subseteq Y$ なら $X \in \mathcal{I}$

(M3) $X, Y \in \mathcal{I}$ かつ $|X| < |Y|$ なら $\exists e \in Y \setminus X, X \cup \{e\} \in \mathcal{I}$

$\mathcal{I}$ に含まれる集合を**独立集合 (independent set)**, 含まれない集合を**従属集合 (dependent set)** と言う. 極大な独立集合を**基 (base)**, 極小な従属集合を**サーキット (circuit)** と呼ぶ. $X \in \mathcal{I}$ について **X の基**とは X に含まれる極大な独立集合のことを言う.

マトロイドの定義として特に重要な (M3) の条件は以下のように言い換えることができる.

Theorem 1. 以下の条件 (M3') は (M3) と同値である.

(M3') $\forall X \subseteq E$, X の基のサイズはすべて等しい.

Proof of Theorem 1. 難しい方の向きである (M3') $\Rightarrow$ (M3) のみ示す. 集合 X, Y を $X, Y \in \mathcal{I}$, $|X| < |Y|$ を満たすとする. ここで $X \cup Y$ の基を考える. $Y \in X \cup Y$ より Y を含む $X \cup Y$ の基が存在し, またそのサイズは $|Y|$ 以上. つまり仮定より $X \cup Y$ のすべての基のサイズは $|Y|$ 以上となる. よって X は $|X| < |Y|$ より明らかに $X \cup Y$ の基とはならないので, ある $e \in E$ で $e \in (X \cup Y) \setminus X = Y \setminus X$, $X \cup \{e\} \in \mathcal{I}$ を満たすものが存在する. □

Theorem 1 について特に $X = E$ の場合を考えるとマトロイドの基のサイズはすべて等しいことが分かる.

定義, 定理が続いたのでここで具体的なマトロイドの例を 2 つ示す.

• 線形マトロイド (linear matroid)

E を行列 A の列集合, $\mathcal{I} = \{X \subseteq E : X$ に含まれる列は線形独立 $\}$ とする. このとき $(E,\mathcal{I})$ はマトロイドであり, **線形マトロイド (linear matroid)** と呼ぶ.

線形マトロイドがマトロイドとなっていることを考える. (M1), (M2) は明らかで以下では (M3) の代わりに (M3') を考える. "列集合 X に含まれる線形独立な列ベクトルの極大集合のサイズ" は線形代数の知見からすべて等しくこの値は

$\mathrm{rank}(X)$ と表される (実際 $Y \subseteq X$ の次元が $\mathrm{rank}(X)$ 未満なら X 内のある列ベクトルを Y に加えることでその次元を 1 増やすことができる).

歴史的に matroid は行列の一般化として考え出されたものである. -oid はアンドロイド (android) やモノイド (monoid) のように「〜 のようなもの」という意味があるのでつまり, matroid は "行列 (matrix) のようなもの" という意味になる. ここでは説明しないが行列の rank の概念はマトロイドについても定義されていて, マトロイドの rank 関数は劣モジュラ性を持つなどの性質がある.

• 閉路マトロイド (cycle matroid)

E を無向グラフ G の辺集合, $\mathcal{I} = \{X :$ 頂点集合を $V(G)$, 辺集合を X とするグラフが森 $\}$ とする. このとき $(E, \mathcal{I})$ はマトロイドであり, **閉路マトロイド (cycle matroid)** と呼ぶ.

閉路マトロイドがマトロイドになっていることを考える. (M1), (M2) は明らかで以下では (M3) の代わりに (M3') を考える. "頂点集合 $V(G)$, 辺集合 X に含まれる極大な森の辺数", これはすべて等しいと言って良いだろう. 具体的にグラフ $(V(G), X)$ の各連結成分の全域木からなる森 (全域森) は基でありまたそのサイズはすべて等しい. 逆にそうでない森については全域木となっていない連結成分が存在し, その成分に 1 本辺を足すことができるので基でない.

次にマトロイドの基についての重要な定理を示す.

Theorem 2 (**基の交換公理**). $\mathcal{B}$ をマトロイド $(E, \mathcal{I})$ の基の集合とする. このとき, 異なる *2* つの基 $B_1, B_2 \in \mathcal{B}$ と $x \in B_1 \setminus B_2$ に対して $(B_1 \setminus \{x\}) \cup \{y\} \in \mathcal{B}$ を満たす $y \in B_2 \setminus B_1$ が存在する[1].

Proof of Theorem 2. (M2) より $B_1 \setminus \{x\} \in \mathcal{I}$ が成り立つ. また, マトロイドの基のサイズはすべて等しいので $|B_1 \setminus \{x\}| < |B_2|$ が成り立ち, (M3) から $y \in B_2 \setminus (B_1 \setminus \{x\}) = B_2 \setminus B_1$ で $(B_1 \setminus \{x\}) \cup \{y\} \in \mathcal{I}$ を満たす $y \in E$ が存在する. さらに $(B_1 \setminus \{x\}) \cup \{y\}$ のサイズは $|B_1|$ に等しいので $\mathcal{B}$ に含まれる. □

ようやく準備を終えて本題に入る. まず, マトロイドの最小基問題とその問題に対する貪欲アルゴリズムを示す.

(マトロイドの最小基問題) $\{E, \mathcal{I}\}$ がマトロイドであるとし, また E 上のコスト関数を $c : E \to \mathbb{R}$ とする. このとき基 B で $\sum_{e \in B} c(e)$ が最小となるものを求める問題を**マトロイドの最小基問題**という.

(貪欲アルゴリズム)

$E = \{e_1, \ldots, e_{|E|}\}$ をコストの昇順 $\big(c(e_1) \le \cdots \le c(e_{|E|})\big)$ に並べ替える.
$X \leftarrow \emptyset$
for $i = 1$ to $|E|$ **do**
  if $X \cup \{e_i\} \in \mathcal{I}$ **then**
    $X \leftarrow X \cup \{e_i\}$
  end if
end for
return X

[1] このとき y として同時に $(B_2 \setminus \{y\}) \cup \{x\} \in \mathcal{B}$ も満たすものが存在することも言える.

ここで連結なグラフ G の閉路マトロイドについて上記の最小基問題を考えると, これは最小全域木問題と等価であり, またそのもとでの貪欲アルゴリズムは Kruskal 法に等しいアルゴリズムであることが分かる.

最後にこの貪欲アルゴリズムの正当性を示すことによって Kruskal 法の正当性を言う.

Theorem 3. 上記の貪欲アルゴリズム G はマトロイド $(E, \mathcal{I})$ の最小基問題に対して必ず最適解を返す[2].

Proof. まず G が解として基を返すことを示す. G を用いて基でない解 Y が求まったとする. すると基でないことから $Y \cup \{e_k\} \in \mathcal{I}$ を満たす $e_k \in E$ が存在する. そのような e_k が最終的な解 Y に含まれていないことから $i = k$ のループの開始時点での解を Z とすると $Z \cup \{e_k\} \notin \mathcal{I}$ が成り立つ. しかし, ここで $Z \cup \{e_k\} \subseteq Y \cup \{e_k\} \in \mathcal{I}$ が成り立つことから (M2) に矛盾する. よって G は解として基を返す.

次に最適性を示す. 集合 Y で Y がある最適解となる基に含まれるとき greedy と呼ぶことにする (最適解は複数存在しうることに注意する). このとき以下の主張を示せば十分である.

(主張) 集合 Y が greedy であるとき, e として $Y \cup \{e\} \in \mathcal{I}$ を満たしかつその時点で最もコストの小さいものを取ってきたとすると $Y \cup \{e\}$ もまた greedy となっている.

Y は greedy であるので Y を含む最適解 B^* が存在する. もし主張における e が B^* に含まれるなら $Y \cup \{e\}$ もまた greedy となるので e が B^* に含まれない場合を考える. $Y \cup \{e\} \in \mathcal{I}$ なので $Y \cup \{e\}$ を含む基が存在して, その中でも $B^* \cup \{e\}$ に含まれるような基 B が存在する ($\Rightarrow$ 補足). このときマトロイドの基のサイズはすべて等しいことから B と B^* は互いにある要素 1 つを除いて一致する. つまりある $e' \in B^* \setminus B$ が存在して $(B \setminus \{e\}) \cup \{e'\} = B^*$ が成り立つ. e はその時点でのコストの最も小さいものとして取ってきていたので $c(e) \leq c(e')$ が成り立ち, よって $c(B) \leq c(B^*)$ となり B も最適解となることが分かる. ゆえに $Y \cup \{e\}$ は greedy となる. □

補足

$Y \cup \{e\}$ を含みかつ $B^* \cup \{e\}$ に含まれるような基が実際に取れることを補足として記す. 結局のところ Theorem 2(基の交換定理) を用いて, $Y \cup \{e\}$ を常に含みながら $B^* \cup \{e\}$ に含まれる要素の数を 1 つずつ増やしていくことで構成することができる.

具体的には, $Y \cup \{e\} \in \mathcal{I}$ より $Y \cup \{e\}$ を含む基が存在し, それを B_1 とする. もし $B_1 \subseteq B \cup \{e\}$ なら構成できたのでそうでない場合を考える. そうでない場合は $e_1 \in B_1 \setminus (B \cup \{e\})$ となる e_1 が取れるので B_1, B に対して Theorem 2 を用いて $e_2 \in B \setminus B_1$ を加えた新しい基 $B_2 = (B_1 \setminus \{e_1\}) \cup \{e_2\}$ が取れる. このとき B_2 は $Y \cup \{e\}$ を含み, かつ B_1 と比べて $B \cup \{e\}$ に含まれる要素の数が 1 (e_2) 増えている. よって以上の操作を繰り返すことで所望の基の存在を実際に構成することで言えた.

[2] 貪欲アルゴリズムが (M1), (M2) を満たす $(E, \mathcal{I})$ の最小基問題に対して常に最適解を返すなら $(E, \mathcal{I})$ は (M3) を満たす, つまりマトロイドとなるという事実も成り立つ..

おまけ 1

マトロイドの貪欲アルゴリズムが正しく動作する例として, マトロイドの最大独立集合問題も挙げられることが多いのでここで紹介する.

(マトロイドの最大独立集合問題) $\{E, \mathcal{I}\}$ がマトロイドであるとし, また E 上のコスト関数を $c : E \to \mathbb{R}_+$ とする. このとき独立集合 X で $\sum_{e \in X} c(e)$ が最大となるものを求める問題を**マトロイドの最大独立集合問題**という.

(貪欲アルゴリズム)

$E = \{e_1, \ldots, e_{|E|}\}$ をコストの降順 $\big(c(e_1) \geq \cdots \geq c(e_{|E|})\big)$ に並べ替える.
$X \leftarrow \emptyset$
for $i = 1$ to $|E|$ **do**
  if $X \cup \{e_i\} \in \mathcal{I}$ **then**
    $X \leftarrow X \cup \{e_i\}$
  end if
end for
return X

このとき上記の貪欲アルゴリズムが常にマトロイドの最大独立集合問題に対する最適解を返すことが先程と同様にして示せる.

おまけ 2

マトロイドを用いて記述できる問題のその他の例として 2 部グラフのマッチングがある. 以下ではその問題の一般化であるマトロイド交叉問題を紹介する.

(マトロイド交叉問題) $(E, \mathcal{I}_1)$, $(E, \mathcal{I}_2)$ を台集合の等しい 2 つのマトロイドとする. このとき集合 $X \in \mathcal{I}_1 \cap \mathcal{I}_2$ で $|X|$ が最大となるようなものを求める問題を**マトロイド交叉問題**という.

2 部グラフのインスタンスとして 2 つの disjoint な頂点集合 U, V とその間の辺集合 E を考える. このとき上記の問題の E はそのままこの E とし, $\mathcal{I}_1 = \{X :U$ 内の各頂点についてその頂点を端点とする X 内の辺は高々 1 本 $\}$, $\mathcal{I}_2 = \{X : V$ 内の各頂点についてその頂点を端点とする X 内の辺は高々 1 本 $\}$ と定めるとマトロイド交叉問題は 2 部グラフのマッチング問題と等価であることが分かる. マトロイド交叉問題に対しては 2 部グラフの増加道アルゴリズムの考え方を応用したアルゴリズムを用いることで効率的に解けることが知られている. またそのアルゴリズムは辺に重みがついた場合にも拡張することが可能である.

参考文献

[1] Michael Goemans 先生の MIT での講義資料
[2] "Combinatorial Optimization" Bernhard Korte and Jens Vygen 著
[3] "Combinatorial Optimization" Alexander Schrijver 著